J. J. Sakurai

現代の量子力学（上）

San Fu Tuan 編

桜井明夫 訳

物理学叢書

56

吉岡書店

現代の量子力学

(上)

J. J. Sakurai 著
(桜井　純)
San Fu Tuan 編
(段 三 孚)
桜 井 明 夫 訳

物理学叢書
56

吉 岡 書 店

Modern Quantum Mechanics

J. J. Sakurai

Late, University of California, Los Angeles

San Fu Tuan, Editor

University of Hawaii, Manoa

The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc.
Menlo Park, California • Reading, Massachusetts
Don Mills, Ontario • Wokingham, U.K. • Amsterdam • Sydney
Singapore • Tokyo • Mexico City • Bogota • Santiago • San Juan

日本語版への序

桜井純さんのModern Quantum Mechanicsが日本語に訳され，日本でも容易に入手して読めるようになったことを，読者の方々とともに喜びたい．

本書の特徴は，UCLAで著者より年長の同僚であったシュウィンガー教授（ノーベル物理学賞受賞者）の推薦文に明快に表現されている．私の拙い訳文で紹介しよう．

「Jun John Sakuraiによる，歴史のあとを追わない量子力学的諸概念の導入は，私がかねてからこう書きたいと考えていたようになされている．彼の早すぎた死のあとで，友人達の暖かい努力によって完成した本書を，量子論の核心への迫り方を記述した優れた著作として私は推薦する．」

量子力学は，現在もなお内容が豊富になりつつある若い学問である．最近の著しい成果の例として，中性子干渉計実験，相関実験，アハラノフ・ボーム効果の検証などが挙げられる．桜井さんはこのような最近発見された量子効果にいたるまで，その核心を熟練した筆致で平易に記述しておられる．

このような量子的現象の観測は技術の発達によって可能になったものであるが，逆に，科学と技術の進展は，かつては一部の理論物理学者にとってのみ必要であったような量子力学の基礎的諸概念の理解を，多くの科学者・技術者にも要求しつつある．量子力学の基礎概念を，適切な具体例を使って分りやすく導入し，しかも全体が有機的に構成されている本書は，量子力学の初歩的講義を受講した程度の予備知識があれば興味深く読み進められる．本書はこのような時代の要求に応えうる優れた著作である．

著者の実弟にあたられる桜井明夫さんの訳文を印刷前に拝見したが，訳文は平明で，原文の内容を正確に読者に伝えるのに成功している．

本書は，米国では大学院1年生用の教科書とされているが，その理由は，日本の大学の量子力学という題目での講義は米国では4年生が選択するのが標準的だとされているからである．したがって，本書は日本の大学での量子力学特講（特論）の教科書という水準になろう．

日米の教育課程の差といえば，私が約20年前に日本の大学院を修了して研究員としてシカゴ大学に行ったとき，桜井さんは早くから活躍しておられ，その時すでに教授であったが，年令は桜井さんが私より一年だけ上にすぎないと聞いて驚いたことを思い出す．

素粒子理論の研究者としての桜井さんが得意とされたことは，新しい実験事実に鋭い関心をもち，その核心を本質論的観点で解明することにあった．しかも，彼の発展させた理論はわかりやすく表現され，容易に応用できるという特徴がある．この特徴は本書の特徴でもある．

本書の読者の中から，量子力学に魅せられて国際的に活躍するコスモポリタンの科学者が輩出することを桜井さんは希望しておられたことと思う．

1988年　筑波にて

原　　康　夫

序　　文

桜井純（J. J. Sakurai）はここセルン（CERN，ヨーロッパ共同原子核研究所）でいつも大歓迎を受ける客員であった．というのは彼は理論そのものを追いかけるだけでなく，さらに実験的事実に関心をよせる数少ない理論家の一人であったからである．しかし彼の喜びはやはり理論物理学とその教育にあり，特に教育の問題については強い意見を抱いていた．彼の考えによれば，大抵の理論物理の教育は余りにも狭く，また余りにも応用からかけ離れていた．“……ハイゼンベルクの場の演算子の形式論には精通していて高尚なのだけれど，励起状態の原子がなぜ光を出すか知らず，空の青さを説明するレーリーの法則を量子論で導出することも分からない無教養な理論家が大勢いる．”と彼は嘆いている．また，学生は教えられたことを使えるようにならなければいけない，“本を読んだものの練習問題ができないという読者は何も学んでいないのだ．”と力説していた†．

彼はこうした原則を，すぐれた著書である「上級量子力学（*Advanced Quantum Mechanics*)」（1967）および「不変性原理と素粒子（*Invariance Principles and Elementary Particles*)」（1964）の中で実現させた．両書ともセルンの図書館で大変よく利用されてきている．新しい本書，「現代の量子力学（*Modern Quantum Mechanics*)」は，さらに広い，そしてそれ程専門化していないグループでもっとよく使用されるに違いない．この本では幅広い興味と徹底した実用性が結びついている．本書の読者は著者の不断の努力が実り，必要な事柄が分かり易く書かれているのを見出すことだろう．

1982年11月1日，桜井純の突然の死により，本書は未完のまま残された．ラインホルト・ベルトルマンと私は桜井夫人がセルンで夫の書類を捜し出

† 訳注：Advanced Quantum Mechanics（1967）の序文より引用されている．

すのに助力した．その中で見つかったのが，仕上前の手書きされた本書の大部分と膨大な演習問題の束であった．完成していたのは，はじめの3章のみであったが，創造的な仕事の大部分が既に出来ていたのは明らかであった．そして，すき間を埋め文章を練り原稿を整えるために，まだ沢山の仕事が残っていたのもまた明らかであった．

本書がこうして完成したのは桜井祝子の決断と，サン・フー・トゥアンの献身のお蔭である．夫の死に直面し，桜井夫人は直ちに夫の最後の努力が無駄になってはならないと決意した．勇を奮い厳然として，夫人はこの計画の陰の牽引力となり，あらゆる障害を乗りこえ本書の高い水準が保たれるよう努めた．サン・フー・トゥアンは桜井の仕事の編集と完成に，自らの時間とエネルギーを進んで提供した．この献身がいか程のものか完全に理解できる者は，おそらく高エネルギー理論物理の高潮した現場近くにいる者だけであろう．

個人的にいえば，J. J. は私にとって長いこと，特に優秀な一人の同僚以上の存在であった．私達がもう決して物理や物理学者そして人生一般に関し共に談笑し合うことがなく，そして彼もこの最後の仕事の成功を見ることがないのだと思うと，胸が痛む．しかし，この仕事がこうして実を結ぶに至ったことを，私は幸せに感じている．

ジョン S. ベル

ジュネーブ，セルンにて

編　者　序

1982年11月，早逝した桜井純（J. J. Sakurai）は量子力学の教科書の原稿を未完のまま残した．この原稿は，彼がUCLA（カリフォルニア大学ロサンジェルス校）で幾度も行った講義に基づいたものである．量子力学には何冊も優れた教科書があるが，それらにはこの分野での最近の発展についての正当な評価が欠けていると，桜井は感じていた．教える時と同じように自分の教科書を書く時にも彼が第一に目ざしたのは，問題を明確に提示し，主要な概念にくっきりとした焦点をあて，そしてこの分野の最近の重要な実験的理論的発展に注意を払うことであった．（例えば，中性子干渉計の実験，ファインマンの経路積分，相関の測定，およびベルの不等式などである．）

こうした目標は，桜井が生前に完成させていた部分の原稿の中で，明確に実現されていた．本書の残りの部分の未完成の草稿と彼の入念に準備された講義ノートが，編者としての私の仕事の基礎となった．私はできる限り桜井自身が書いたものを逃さないようにした．そして最初の（完成されていた）3章で打ち立てられていたすばらしい水準を見ては，この仕事の逐行にしばしば恐れを抱いたほどだ．しかし原文と彼の取り組み方の多くをそのまま保つことで，著者の持っていたヴィジョンを達成することに成功したと，私は確信している．

この本は大学の初級ないし上級の学年で量子力学を学んだことのある，大学院の１年生を対象にしている．初学者のために量子力学の入門を講じようというのではない．読者には時間を含む場合と含まない場合の波動方程式を解いた経験が，いくらかはあると仮定している．力の働かない領域でのガウス型波束の時間的発展には慣れているものと仮定しており，１次元の透過・反射問題を解くこともできるとしている．エネルギーの固有関数や固有値の一般的性

格も，この教科書を使う学生はいくらか知っているものとする．

本書では最初から量子系に取り組み，直ちに量子論の形式を紹介する．量子力学で扱う通常の基礎的事項を詳しく述べると共に，新しい発展についても議論する．とりわけ，量子ダイナミックス，JWKB 近似，経路積分の方法，ベクトルポテンシャル，対称性，近似法，パウリの原理，ヤングの図式，それに散乱理論などを扱う．

付録 A にはシュレーディンガー方程式の基本的な解が簡潔にまとめてある．また初等的な量子力学の教科書の文献リストを，注解をつけてまとめておいた．本書のあちこちには演習問題が散りばめてあることも，最後に述べておこう．これらの演習問題は本書の重要な部分である．すなわち，量子力学では，すべての分野の学問と同様，理論を実際に使ってみることで，習熟度が判定できる．なお，この教科書を採用する教員には，解法の手引書が用意されることになろう．

謝　辞

お世話になったすべての方々にお礼を述べるのは不可能であるが，特に次の方々のご協力に感謝したい．セルンの John S. Bell 博士には，第 3 章を校正・修正いただき，また全 7 章にわたり初校の誤りを見ていただいた．ジョンズ・ホプキンス大学の Thomas Fulton 博士は，第 7 章13節のためにクーロン散乱（桜井が本書に含める積りであったが，生前には予備的原稿さえできていなかった）に関する自分の講義ノートを提供され，また第 3 章をていねいに校正・修正され，さらに角運動量の合成則の証明（付録 B を見よ）を用意された．残りの章を注意深く見ていただいたのは，ビーレフェルト大学の Dieter Schildknecht 博士（第 1 章），ウィーン大学理論物理学研究所の Reinhold Bertlmann 博士（第 2 章），ハワイ大学の Sandip Pakvasa 博士（第 4 章，第 6 章），カリフォルニア大学アーヴィン校の Gordon Shaw 博士（第 5 章），およびカリフォルニア工科大学の Steven Frautschi 博士（第 7 章）である．とりわけ第 5 章には改訂が必要であったが，Shaw 博士は，近似法のもう一つの

応用としてファン・デル・ワールス力の項目を含める仕事を引き受けられた．私の以前の学生である Brent Hermsmeier, He Zhong Xiang, Daniel Weeks と Will Wilson は，1984年春のハワイ大学での私の大学院向き量子力学コースを受けながら，ミスプリントを直しいくつかの問題の解答を整理してくれた．最後に，桜井教授の以前の学生である Pisin Chen 博士と P. Q. Hung 博士の二人は，紛失した解答を捜すために協力し，また桜井教授のファイルを捜しても見つからなかったときは解答を準備してくれた．Nigel Wright と Minh Tran もまた，解答に協力した．

マノアのハワイ大学の物理・天文学教室と高エネルギー物理グループは，編者の仕事の遂行にあたり物心両面で便宜をはかって下さった．特に David E. Yount 学科主任からは，精神的援助をありがたくいただいた．桜井教授の以前の秘書である，UCLA の Gilda Reyes さんは，完成した第一原稿を注意深くタイプして下さった．以上，名をあげたすべての方々に，私は深く感謝し，労をたたえたい．

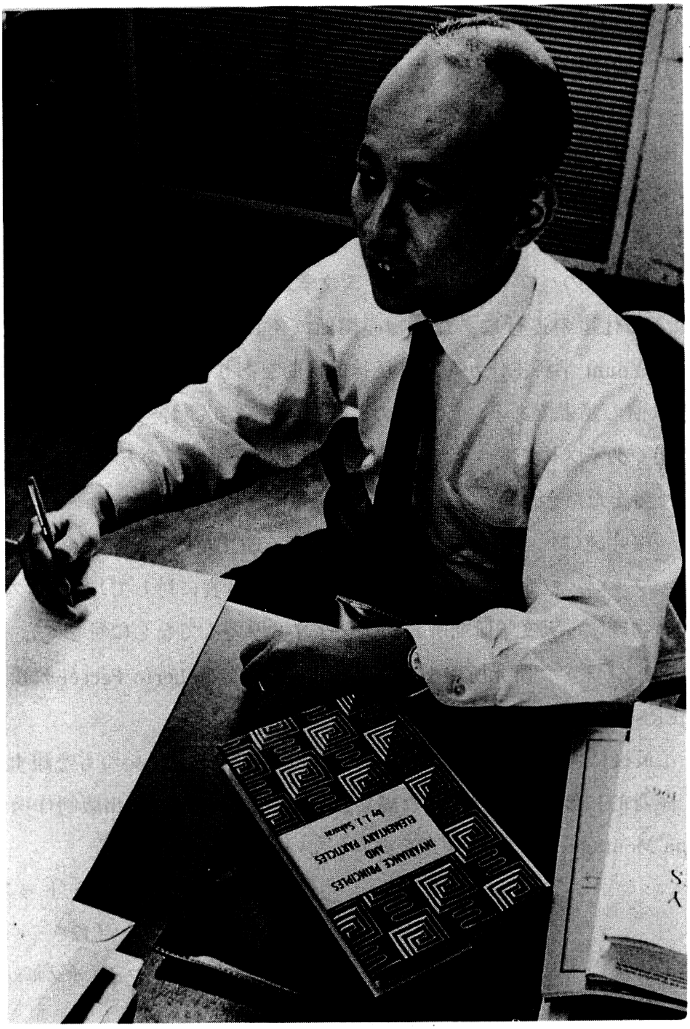
桜井純に代って，さらに感謝の意を，UCLA 物理学教室，アレキサンダー・フォン・フンボルト財団（上級米国科学者賞に対して），マックス・プランク物理学・天文学研究所および CERN（厚いもてなしに対して），またマックス・プランク研究所の Leo Stodolsky 教授と Roberto Peccei 教授，および CERN の Maurice Jacob 教授に述べたい．

最後に，激励と援助をいただいた桜井祝子夫人と，いつも悲観することなく献身的に努力を続けられた編集者の Richard Mixter，出版制作担当の Kristina Montague に，私の謝意を表わしたい．

サン・フー・トゥアン

（段　三　孚）

1985年1月1日　ハワイ・ホノルルにて



桜 井　 純 (1933—1982)

追　悼

桜井純（Jun John Sakurai）は1933年に東京で生まれ1949年に高校生としてアメリカへ渡った．彼はハーバード大学とコーネル大学大学院に学び，そこで1958年に学位を受けた．そしてシカゴ大学で物理学の助教授に任命され，1964年には正教授となった．彼は1970年までシカゴに滞在したのちカリフォルニア大学ロサンジェルス校に移り，生涯そこに勤めていた．生前に彼は素粒子物理学の論文を119篇書き，また量子論と素粒子論に関する，何冊かの単行書や小冊子を表わしている．

理論物理学という学問は，物理の世界を簡潔にまた分かり易く，理論的に系統だって記述することを主な目的としている．自然は捉えがたくまた複雑であるから，理論物理の研究には新しく発見された現象の最前線へ向かう，大胆で情熱的な冒険心が要求される．これこそ桜井が非凡な物理学上の洞察力と直観を示し腕をふるった領域であり，新しい現象を分かり易い物理の言葉で，専門外の人に説明する能力を発揮した．これは彼の非常に明快な教科書である，不変性原理と素粒子（*Invariance Principles and Elementary Particles*）および上級量子力学（*Advanced Quantum Mechanics*）ならびに彼の書いた総合報告や夏の学校の講義録を読むとよく分かる．素粒子物理学に関して私の理解した事柄の大部分が，こうした教科書や彼の論文，あるいは彼からの個人指導により得られたといっても，いい過ぎでない．

未だ大学院生であった頃，桜井は今では弱い相互作用のV-A理論と呼ばれている理論を，リチャード・ファインマン，マレー・ゲルマン，ロバート・マルシャックおよびジョージ・スーダシャンと独立に（また同時に）提唱した．1960年に彼は *Annals of Physics* 誌に，おそらく彼の単独の最も重要な論文の一つである，予言的な論文を表わした．それは強い相互作用の理論を，

アーベル型および非アーベル型（ヤン-ミルズ）ゲージ不変性に基づいて構築しようとした，最初の真剣な試みである．この初期の仕事がきっかけとなり，理論家達はゲージ（ベクトル）場に対する質量生成の機構，今日ではヒッグス機構として認められているもの，を理解しようと試みた．とりわけこの仕事は，ゲージ理論の下で各種の力を実際に統一しようとする探求心を刺激した．それは弱い相互作用と電磁相互作用の力を統一した，有名なグラショウ-ワインバーグ-サラム理論の中で成功に輝いている．現象論の面では，桜井はハドロン力学のベクトル中間子優位モデルを追求し，これを精力的に唱えた．ω 中間子と ϕ 中間子の状態の混合を，最初に議論したのは彼である．実際，彼はもっと一般的な意味で，素粒子物理学の現象論に数々の重要な貢献をした．これは彼がいつも実験活動に深く関心をよせていたからである．

私は25年以上にわたり Jun John と知り合いであった．そして理論物理学者としての彼のすばらしい力量ばかりでなく，心の暖かさ寛容さに感嘆していた．1957-1958年にコーネルの大学院生であった彼は，K-核子分散関係の先駆的な研究の時間をさいて，バークレーで同じテーマの学位論文の仕事をしていた私を（盛んに情報を送って）援助してくれた．またサンディプ・パクバサと私は特に，重いクォークの弱い結合に関する彼の最後の論文の一つに，共著者として加わることができた．この仕事にも，物理を研究する際の彼の影響力の強い，直観的なスタイルが反映している．Jun John がこの論文を特に好んだ発表業績の中に数えあげてくれたことを，私達は昔を懐しみながら，もちろん感謝している．

物理学界は桜井純の死により，大きな損失を受けた．哀惜の情は，私にとってひとしおである．現代の量子力学の出版にあたり，彼の原稿を編集し完成させる機会を持ったことを私は深く感謝している．この意義深い務めを通じて Jun John に対する尊敬の念を表わす機会を持てたことは，私にとって最高の賜物である．

サン・フー・トゥアン

（段 三 孚）

目　次

（上　巻）

（下巻）主要内容

〈訳　注〉

原著 Modern Quantum Mechanics は1994年に改訂版が出版された．その中では，主として，1) 第5章5.2縮退がある場合の摂動論の記述(特に波動関数の1次の変化)が訂正され，2) 第7章7.13クーロン散乱の節が，物理的側面を加筆して再構成されている．また巻末に収められた二つの増補部分では，幾何学的位相と非指数関数的崩壊が議論されているが，その中の前者は本翻訳書で初版刊行時に訳者により加筆されていたものの英訳である．

第1章

基 礎 概 念

20世紀はじめの27年間に，微視的現象に関する我々の理解には革命的変化が起こった．それは自然科学の歴史上，例を見ないことである．我々は古典物理学の妥当性に厳しい制限があることを目のあたりにしたばかりでなく，古典論に代る理論がはるかに豊富な内容と，はるかに広範な適用領域を持つことを知ったのである．

量子力学の勉強をはじめる際の最も伝統的な方法は，歴史的発展を追うことであろう．プランクの放射則，アインシュタイン・デバイの比熱理論，ボーアの原子，ド・ブロイの物質波などを説明し，またコンプトン効果，フランク・ヘルツの実験，ダヴィソン・ジャーマー・トンプソンの実験といった重要ないくつかの実験を注意深く解析する．そうすれば20世紀第1四半期の物理学者が，それ迄いつくしんで来た古典物理学を少しずつ棄て去らなければならなくなった様子が，我々に分かってくる．そして，初期の錯誤にも拘わらず，ハイゼンベルク，シュレーディンガー，ディラックといった偉人達が，どのようにしてついに今日の姿の量子力学を作り上げるのに成功したかが分かるであろう．

しかしこの本ではそうした歴史的記述をとらない．その代り古典的概念を根底から覆えす一例から始めるとしよう．最初にショック療法を受けることによって，読者はいわゆる“量子力学的考え方”に早くから慣れていけるであろう．

1.1 シュテルン・ゲルラッハの実験

この節ではもっぱらシュテルン・ゲルラッハの実験を例としてとりあげる．これは1921年，O. シュテルンにより考案され，1922年にフランクフルトにおいてW. ゲルラッハと共同して実施された．この実験は古典力学の概念から根本的に離れなければならない必然性を，劇的に説明する．次の節ではいささか公理論的に量子力学の基礎形式を示すが，いつも頭の隅にはシュテルン・ゲルラッハの実験例がある．ある意味では，シュテルン・ゲルラッハ型の2準位系は，最も非古典的で最も量子論的な系といえる．2準位系を含む問題をしっかりと理解することは，まじめに量子力学を学ぼうとする学生にとって，甲斐のあることであろう．そこでこの本では2準位系の問題をくりかえし引用していく．

実験の説明

ここで現代物理学のたいていの教科書に書いてあることであるが*，シュテルン・ゲルラッハの実験の様子を簡単に述べる．まず，銀（Ag）の原子を炉の中で熱する．炉には小孔が開いており，幾らか銀原子が逃げていく．図1.1にあるように原子線（ビーム）はコリメーターを通過したのち，一対の磁極の作る不均一磁場にさらされる．磁極の1つは鋭くとがっている．

この磁場が銀原子に与える影響を調べなければならない．それには次のような大変簡単化した銀原子のモデルで十分である．銀原子は1個の核と47個の電子とから成るが，その中の46個は球対称な電子雲を形成し，正味の角運動量を持たない．今の議論には重要でない核スピンを無視すれば，原子全体の角運動量は47番目の5s電子1個の角運動量となる．それは電子の軌道運動によるのではなくもっぱら固有のスピンに由来する．47個の電子は，電子より約

* シュテルン・ゲルラッハの実験に関しては，初等的だが啓発的な議論がFrench and Taylor（1978, pp. 432-38）にある．

2×10^5倍の重さの核に結びついている．その結果，重い原子は全体として47番目の電子のスピン磁気モーメントに等しい磁気モーメントを持つことになる．いいかえれば原子の磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ は電子のスピン $\boldsymbol{S}$ に比例しており

$$\boldsymbol{\mu} \propto \boldsymbol{S}, \tag{1.1.1}$$

この式の正確な比例定数はずれが約0.2%の精度で $e/m_e c$ であることが分かっている．（本書では $e<0$ とする．）

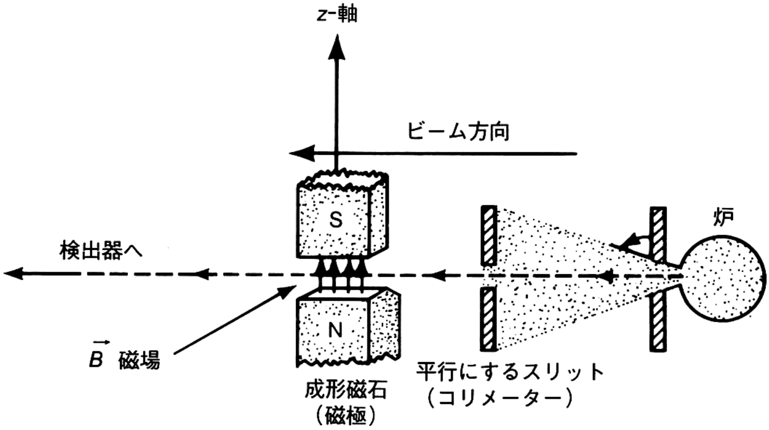


図 1.1.　シュテルン・ゲルラッハの実験

磁場と磁気モーメントの相互作用エネルギーは $-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$ だから，原子の受ける力の z-成分は

$$F_z = \frac{\partial}{\partial z}(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}) \simeq \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \tag{1.1.2}$$

で与えられる．ここで z-方向以外の磁場 $\boldsymbol{B}$ の成分は無視した．原子は全体としては重いので，軌跡という古典的概念を適用して不都合はない．この点は，あとで導くハイゼンベルクの不確定性原理を用いて正当化できる．図1.1の配置では $\mu_z>0$ $(S_z<0)$ の原子は下向きの力を受け，$\mu_z<0$ $(S_z>0)$ の原

子は上向きの力を受ける．そこで原子線は μ_z の値に応じて分裂することになる．つまり SG（シュテルン・ゲルラッハ）の装置は $\boldsymbol{\mu}$ の z-成分，すなわち比例定数のかかった $\boldsymbol{S}$ の z-成分を“測定”している．

炉の中の原子の向きは乱雑であり，$\boldsymbol{\mu}$ が特定の方向を向くということはない．もし電子が自転している古典的な物体ならば，μ_z の値は $|\boldsymbol{\mu}|$ から $-|\boldsymbol{\mu}|$ までのすべての値をとるであろう．そのとき SG 装置から出てくるのは図1.2a に示されているような連続的な線束と期待される．ところが実験で観測される状況は，むしろ図1.2b に近い．つまり SG 装置は炉から出た銀原子線を二つの別々の成分に分けるのである．この現象は量子論の初期に“空間の量子化”と呼ばれた．比例定数を別にすれば $\boldsymbol{\mu}$ と $\boldsymbol{S}$ とは同一視できるから，

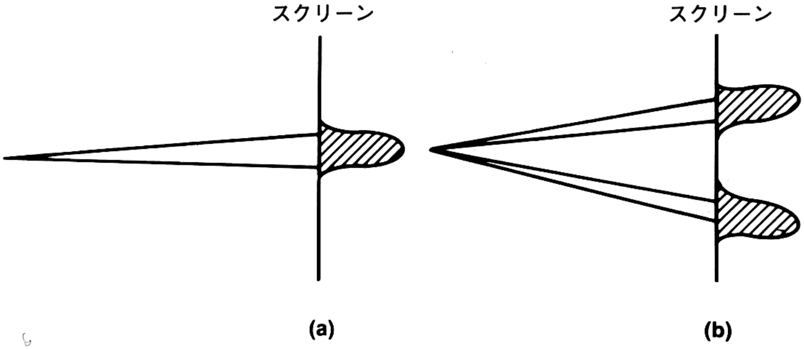


図 1.2. SG 装置からのビーム；(a) 古典物理から期待されるビーム，(b) 実際に観測されるビーム

$\boldsymbol{S}$ の z-成分で観測できるのは，上向きの S_z と下向きの S_z の2つの値だけといえる．これらを S_z+，S_z- と呼ぼう．S_z のこの二つの可能な値は，角運動量のある基本単位の定数倍である．数値的には $S_z=\hbar/2$，あるいは $-\hbar/2$ であることが分かる．ここで

$$\begin{aligned}\hbar &= 1.0546\times10^{-27}\mathrm{erg\cdot s}\\ &= 6.5822\times10^{-16}\mathrm{eV\cdot s}\end{aligned} \qquad (1.1.3)$$

である．電子スピン角運動量の“量子化”は，シュテルン・ゲルラッハの実験から導ける第一の重要な特徴である．

もちろん上下方向とか z-軸に特別な意味はない．原子線を y-方向に進ませながら，水平方向，例えば x-方向に不均一磁場をかけても全く同じである．こうして炉からの原子線を S_x+ と S_x- の成分に分離することもできたのである．

一続きのシュテルン・ゲルラッハの実験

ここで一続きのシュテルン・ゲルラッハの実験を考察しよう．すなわち原子線が二つ以上のSG装置を次々と通過していくのである．初めに考える配置は比較的自明なものである．炉から出てきた原子線を，図1.3a に示す装置に送りこむ．z-方向に不均一場のある装置をここで SG$\hat{\boldsymbol{z}}$ と表わす．はじめの SG$\hat{\boldsymbol{z}}$ 装置から出た S_z- 成分を止めてしまい，残りの S_z+ 成分をもう一つの SG$\hat{\boldsymbol{z}}$ 装置にかける．今度はただ一つの成分の原子線が第２の装置から出て

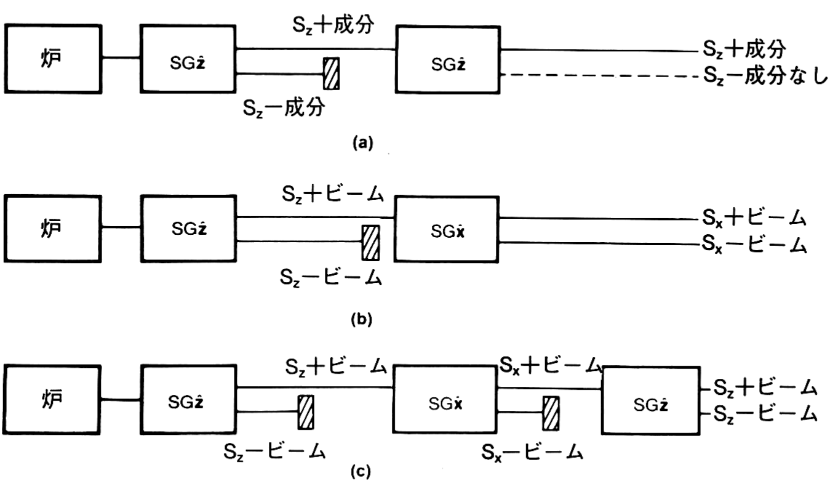


図 1.3.　一続きのシュテルン・ゲルラッハの実験

くる．S_z＋成分だけである．このことはあまり驚くに当たらない．もし原子のスピンが上向きなら，第1と第2のSG$\hat{z}$装置間にスピンを回転させる外場がない限り，ずっと上向きのままであると期待できる．

もう少し面白い配置を図1.3bに示す．この図では最初のSG装置は前と同じだが，第2のもの（SG$\hat{x}$）にはx-方向に不均一の磁場がかかっている．第2の装置（SG$\hat{x}$）に入って来たS_z＋の原子線は，ここで強度の等しい2成分，S_x＋成分とS_x－成分に分かれる．これをどう説明できるであろうか．第1の装置（SG$\hat{z}$）から出て来たS_z＋の原子線の50%が，S_z＋かつS_x＋の両方の特徴を備えた原子から成り，残りの50%がS_z＋かつS_x－であるのであろうか．以下に示すように，このような描像では困難に陥ることになる．

ここで3番目として図1.3cに示す配置を考えよう．これは量子力学系の特殊性を劇的に示してくれる．今度は図1.3bの配置に，さらにSG$\hat{z}$型の第3の装置をつけ加えた．すると第3の装置からは一つではなく二つの成分が出てくることが，実験的に観測される．出て来た原子線にはS_z＋成分とS_z－成分の両方が含まれている．原子が第1の装置を出たあと，確かにそのS_z－成分は完全に阻止されていたのだから，これは正に驚くべきことである．すでに消したと思っていたS_z－成分が再び現われることができたのはなぜであろう．第3の装置に入って来る原子に，S_z＋およびS_x＋の両成分を持たせるモデルは，明らかに不満足である．

この例は，量子力学ではS_zとS_xの二つを同時に決められないことの説明に，よく用いられる．もう少し正確にいうと，第2の装置（SG$\hat{x}$）でS_x＋を選んだことにより，S_zに関する以前の情報が全く破壊されたのである．

この状況を，古典力学の回転しているこまと比較すると面白い．こまでは，角運動量

$$\boldsymbol{L} = I\boldsymbol{\omega} \tag{1.1.4}$$

は角速度ベクトル$\boldsymbol{\omega}$の角成分を決めれば測定できる．この物体が，どの方向にどれだけの速さで回っているかを観測すると，ω_x，ω_y，ω_z，は同時に決定

できるのである．慣性モーメント I は，質量密度とこまの幾何学的形を知れば計算できるので，こうした古典的な例では L_z と L_x の両方を指定するのに何の困難もない．

S_z と S_x を決める際に遭遇した制限は，実験家の力が不足していたためではないことを，はっきりと理解しておきたい．実験技術を改良したところで，図1.3c の第 3 の装置から出る S_z-成分を消すことはできない．量子力学の特異性は実験そのものから我々に課せられているのである．事実こうした制限は，微視的現象に固有のものである．

光の偏光との類似性

以上の状況はとても新奇に見えるので，良く知られた古典的な例との類似性を示すと，この場の助けになろう．そのために少し脱線して，光の波の偏光を考察しよう．

z-方向に進む単色光の波を考える．偏光ベクトルが x-方向の直線偏光を，簡単のために x-偏光と呼ぼう．これは x-方向に振動する空間・時間に依存する電場

$$\boldsymbol{E} = E_0\hat{\boldsymbol{x}}\cos(kz-\omega t) \tag{1.1.5}$$

を持つ†．同様に z-方向に伝播する y-偏光

$$\boldsymbol{E} = E_0\hat{\boldsymbol{y}}\cos(kz-\omega t) \tag{1.1.6}$$

も考えられる．(1.1.5) や (1.1.6) の型の偏光は，偏光していない光線をポラロイドフィルターを通過させれば得られる．ここで x-方向に偏光している光線のみを選び出すフィルターを，x-フィルターと呼ぼう．もちろん x-フィルターを伝播（z-）方向の回りに90°回転させれば，y-フィルターになる．よく知られているように，光線を最初 x-フィルターに通し続いて y-フィルター

† 訳注：本書では単位ベクトルを ∧ をつけて表わす．

にあてると，効率100％のポラロイドを使う限り光は全く出て来ない．（図1.4a を参照．）

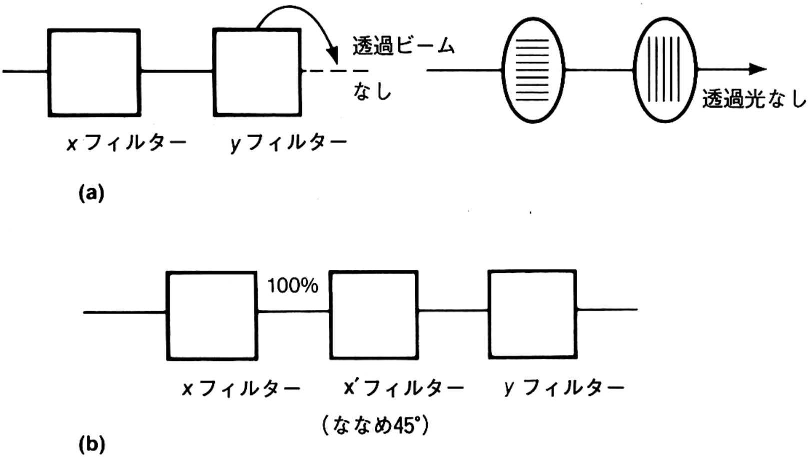


図 1.4. 偏光フィルターにかけられた光線

さらに興味深い状況を作るには，x-フィルターと y-フィルターの間にもう1枚ポラロイドを入れればよい．このポラロイドは xy 面内で x-方向と45°の角度——x'-方向と呼ぶ——の光線のみを選び出す．（図1.4b を参照．）今度は y-フィルターから光線が出て来る．ところで x-フィルター通過直後の光には，y-方向の偏光成分がなかった．すなわち，ひとたび x'-フィルターが入りこみ x'-偏光を選択すると，以前に光線が x-偏光にあったことなど，重要でなくなってしまう．2番目のポラロイドが x'-偏光を選び出したことで，偏光についての以前の情報が破壊される．この状況は前に図1.3b のシュテルン・ゲルラッハの実験配置で遭遇した状況と，非常によく似ている．それは次のような対応関係

$$
\begin{aligned}
S_z \pm \text{ 原子 } &\leftrightarrow x\text{-},\ y\text{-偏光}, \\
S_x \pm \text{ 原子 } &\leftrightarrow x'\text{-},\ y'\text{-偏光}
\end{aligned}
\tag{1.1.7}
$$

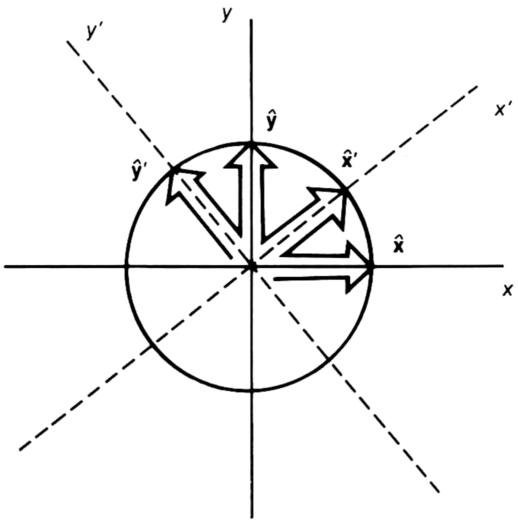


図 1.5. x'-軸 y'-軸の方向

を仮定してみると分かる．ここで x'-および y'-軸は図1.5に示すように定義される．

45°偏光（x'-および y'-偏光）の光線を，古典電磁気学の範囲でどのように定量的に記述できるか，調べてみよう．図1.5を用いて

$$\begin{aligned} E_0\hat{\boldsymbol{x}}'\cos(kz-\omega t) &= E_0\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\,\hat{\boldsymbol{x}}\cos(kz-\omega t)+\frac{1}{\sqrt{2}}\,\hat{\boldsymbol{y}}\cos(kz-\omega t)\right], \\ E_0\hat{\boldsymbol{y}}'\cos(kz-\omega t) &= E_0\left[-\frac{1}{\sqrt{2}}\,\hat{\boldsymbol{x}}\cos(kz-\omega t)+\frac{1}{\sqrt{2}}\,\hat{\boldsymbol{y}}\cos(kz-\omega t)\right] \end{aligned} \tag{1.1.8}$$

が得られる．図1.4b にある 3 枚のフィルター配置では，第 1 のポラロイドから出た光線は x-偏光であり x'-偏光と y'-偏光の線形結合とみなされる．第 2 のポラロイドは x'-偏光を選択し，次にこれが x-偏光と y-偏光の線形結合とみなされる．そこで最後に 3 番目のポラロイドが y-方向の成分を選ぶ．

一続きのシュテルン・ゲルラッハの実験（図1.3c）と 3 枚のフィル

ターの実験（図1.4b）との対応関係（1.1.7）を用いると，銀原子のスピン状態を新しい種類の2次元ベクトル空間内の，一種のベクトルで表わせないかと思えてくる．これは抽象的なベクトル空間であり，ふつうの2次元（xy）空間と混同してはならない．ちょうど（1.1.8）で，$\boldsymbol{x}'$-偏光の偏光ベクトル $\boldsymbol{x}'$ を分解するのに $\hat{\boldsymbol{x}}$ と $\hat{\boldsymbol{y}}$ を基底ベクトルとして使ったように，S_x＋状態をベクトルで表わすのはもっともなことであろう．これはディラックの記法でケットと呼ぶベクトルであり，次節で十分に議論を展開する．このベクトルを $|S_x;+>$ という記号で書き，S_z＋および S_z－状態にそれぞれ対応する二つの基底ベクトル $|S_z;+>$ および $|S_z;->$ の線形結合であらわす．すると（1.1.8）との類推により

$$|S_x;+> \stackrel{?}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;+>+\frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;->, \tag{1.1.9a}$$

$$|S_x;-> \stackrel{?}{=} \frac{-1}{\sqrt{2}}|S_z;+>+\frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;-> \tag{1.1.9b}$$

でないかと推測できよう．後に量子力学の一般的形式を用いて，これらの表式をどのように得るかを示す．

したがって図1.3c にある第2の SG$\hat{\boldsymbol{x}}$ 装置から出て来た阻止されない成分は，（1.1.9a）の意味で S_z＋とS_z－の重ね合わせとみなされる．3番目の SG$\hat{\boldsymbol{z}}$ 装置から2成分が現われたのは，このためである．

ここですぐ浮かぶ疑問は，S_y±状態をどう表したらよいかである．対称性の議論を使えば，x-方向に進むS_z±原子線を SG$\hat{\boldsymbol{y}}$ 装置に通して観測するとき得られる様子はy-方向に進むS_z±の線を SG$\hat{\boldsymbol{x}}$ 装置に通す場合と，きわめて似かよっているであろう．そこで S_y±のケットは $|S_z;\pm>$ の線形結合とみなすべきであろう．しかし（1.1.9）より分かるように，$|S_x;\pm>$ を書いた際に，可能な表わし方をもう使い果してしまった．我々がベクトル空間を定式化するとき，S_y±状態と S_x±状態をどう区別できるであろうか．

ここでも偏光との類似性が助けとなる．今度は円偏光の光線を考える．円偏光は直線偏光を1/4波長板を通過させると得られる．このような円偏光を

x-フィルターか y-フィルターに通すと再び x-偏光か y-偏光が，等強度で得られる．周知の通り，円偏光は45°の直線偏光（x'-偏光または y'-偏光）とは全く違う．

数学的に，どのように円偏光を表わしたらよいであろう．右回り円偏光とは x-偏光と y-偏光の線形結合に他ならない．その際 y-偏光成分と x-偏光成分の電場の振動は，位相が90°ずれている*．すなわち

$$\boldsymbol{E} = E_0\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\,\hat{\boldsymbol{x}}\cos(kz-\omega t)+\frac{1}{\sqrt{2}}\,\hat{\boldsymbol{y}}\cos\left(kz-\omega t+\frac{\pi}{2}\right)\right\} \tag{1.1.10}$$

である．複素数の記号を用い，ϵを次のように持ちこんで

$$\mathrm{Re}\,(\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{E}/E_0 \tag{1.1.11}$$

と書くのがエレガントであろう．右回りの円偏光に対しては

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\boldsymbol{x}}e^{i(kz-\omega t)}+\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{\boldsymbol{y}}e^{i(kz-\omega t)}\right] \tag{1.1.12}$$

と書くことができる．ここで $i=e^{i\pi/2}$ を使った．

銀原子のスピン状態とは

$$\begin{aligned} S_y+\text{ 原子} &\leftrightarrow \text{ 右回り円偏光光線}, \\ S_y-\text{ 原子} &\leftrightarrow \text{ 左回り円偏光光線} \end{aligned} \tag{1.1.13}$$

という類推をつけることができる．これを（1.1.12）に適用すると，基底ケットの前の係数に複素数を許せば，$S_y\pm$原子を我々のベクトル空間形式に入れるのに困難はなく

$$|S_y;\pm> \overset{?}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;+> \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|S_z;-> \tag{1.1.14}$$

＊ 残念なことに円偏光の右回り左回りの定義には合意がなく，文献により異なっている．

のように表わせよう．これは明らかに（1.1.9）とは異なる．このようにして，銀原子のスピン状態を記述するのに必要な2次元ベクトル空間は，複素ベクトル空間であることが分かる．すなわちこのベクトル空間内の任意のベクトルは基底ベクトル $|S_z;\pm>$ の線形結合で表わされ，一般に係数は複素数である．実際このような初等的な例で，既に複素数の必要性が明らかになるのは，注目すべきことであろう．

これまでに読者は，我々が光子について語るのをわざと省いてきたのに気づかれたに違いない．つまり我々は光の量子的側面を全く無視してきた．個々の光子の偏り状態には，どこでも触れていない．我々が調べた類似性は，個々の原子のスピン状態を記述する抽象的ベクトル空間のケットと，古典電磁場の偏光ベクトルの間の関係である．実際に光子という概念を持ちこんで，円偏光の1光子がある直線偏光の状態に見出される確率などを述べ，類似関係をもっと生き生きとさせることもできた．しかしここではその必要はない．そうしなくてもこの節の主な目標——量子力学的状態は抽象的複素ベクトル空間のベクトルによって記述されるという考えを導入すること——はなしとげられている*.

1.2 ケット，ブラおよび演算子

前節で，シュテルン・ゲルラッハの実験の解析からどのようにして複素ベクトル空間を考えるように至ったかを示した．この節と次の節では，量子力学で使われるベクトル空間の基本的数学を定式化しよう．この本ではずっとP. A. M. ディラックが発展させたブラとケットの記法を用いる．線形ベクトル空間の理論は，もちろん量子力学の誕生以前から数学者に周知であったが，ベクトル空間を導入するディラックの手法は特に物理学者の立場から見ると，大いに利点がある．

* 光子の偏りを注意深く調べることによって量子力学の基礎概念を把握したいと思っている読者には，Baym（1969）の第1章が大変啓発的である．

ケット空間

複素ベクトル空間を考える．その次元は対象とする物理系の性質によって指定される．原子のスピンが唯一つの量子力学的自由度である，シュテルン・ゲルラッハ型の実験では，次元は原子がSG装置を通ったときに取りうる可能な道筋の数で決まる．前節の銀原子の場合，S_zが取りうる二つの値に対応して，次元は2である*．後に1.6節で例えば粒子の位置（座標）または運動量といった連続スペクトルの場合を考える．このとき取りうる値の数は非可附番無限であり，該当するベクトル空間は，無限次元のベクトル空間を研究したD. ヒルベルトにちなんで**ヒルベルト空間**と呼ばれている．

量子力学では，物理的状態，例えばスピンの方向が決まった銀原子を，複素ベクトル空間の**状態ベクトル**で表わす．ディラックにならい，このようなベクトルを**ケット**と呼び$|\alpha\rangle$と記そう．この状態ケットは物理的状態の完全な情報を含んでいるものと仮定しておく．すなわち状態に関してたずねられるすべての事項が，このケットの中に含まれているとする．二つのケットは加え合せることができる：

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle. \tag{1.2.1}$$

和$|\gamma\rangle$は新しい一つのケットである．$|\alpha\rangle$に複素数cをかけてできる積$c|\alpha\rangle$も新しい一つのケットである．数cはケットの左にきても右にきてもよく，変りがない：

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c. \tag{1.2.2}$$

特別な場合としてcがゼロのとき，かけてできるケットは**零ケット**といわれる．

物理的仮定の一つとして，$|\alpha\rangle$と$c|\alpha\rangle$（ただし$c \neq 0$）は同じ物理状態をあらわすことにする．つまりベクトル空間でただ，“方向”だけが重要なのである．数学者なら我々の扱うのはベクトルでなくむしろ半直線（ray）

---

* 多くの物理系で，状態空間の次元は可附番無限である。我々はふつうケット空間に有限の次元数Nをつけるが，結果は可附番無限の次元に対しても同様に成立する．

だというところであろう.

運動量やスピン成分といった**観測量**† (observable) は問題にするベクトル空間の**演算子**, 例えば A によって表わされる. 一般に演算子はケットに左から作用し

$$A\cdot(|\alpha>)=A|\alpha> \tag{1.2.3}$$

はある別のケットになる. 演算の積については後にいろいろと述べる.

一般に $A|\alpha>$ は $|\alpha>$ の定数倍ではない. しかし, 演算子 A の**固有ケット**と呼ばれ

$$|a'>,\ |a''>,\ |a'''>,\ \cdots \tag{1.2.4}$$

の記号で表わされる重要な特別のケットがあり, これらは

$$A|a'>=a'|a'>,\ A|a''>=a''|a''>\cdots \tag{1.2.5}$$

という性質を持つ. ここで a', a'', …は単なる数である. 固有ケットに A を作用させると, 掛かる係数を除いて元と同じケットを再現することに注意しよう. これらの数の集合 $\{a', a'', a''', \cdots\}$ は簡潔に $\{a'\}$ とも記され, 演算子 A の**固有値**の集合と呼ばれる. 固有値に特定の処方で順序をつける必要が生じたら $\{a', a'', a''', \cdots\}$ の代りに $\{a^{(1)}, a^{(2)}, a^{(3)}, \cdots\}$ と書くのがよい.

固有ケットに対応する物理的状態は, **固有状態**と呼ばれる. 最も単純なスピン1/2の系の場合に, 固有値と固有ケットの関係 (1.2.5) は

$$S_z|S_z;+>=\frac{\hbar}{2}|S_z;+>,\qquad S_z|S_z;->=-\frac{\hbar}{2}|S_z;-> \tag{1.2.6}$$

と表わされる. $|S_z;\pm>$ は演算子 S_z の, 固有値 $\pm\hbar/2$ の固有ケットである. ここで $|S_z;+>$ の代りに単に $|\hbar/2>$ を使ったとすると, 固有ケットを固有

---

† 訳注：オブザーバブル, 観測可能量という訳語も用いられる.

値で分類し$|a'\rangle$と表わす記法との一致がよい．しかし前節で用いた$|S_z;\pm\rangle$の記法がここではもっと便利である．なぜならば我々はS_xの固有ケット

$$S_x|S_x;\pm\rangle=\pm\frac{\hbar}{2}|S_x;\pm\rangle \tag{1.2.7}$$

も考察するからである．

前に述べたようにベクトル空間の次元はシュテルン・ゲルラッハ型の実験における分裂数で決まる．もっと形式的にいえば我々は観測量AのN個の固有ケットで張られるN次元ベクトル空間を扱うのである．任意のケット$|\alpha\rangle$は，a'，a''，$\cdots a^{(N)}$および複素係数$c_{a'}$を用いて

$$|\alpha\rangle=\sum_{a'}c_{a'}|a'\rangle \tag{1.2.8}$$

と書くことができる．このような展開がユニークかどうかという問題は，固有ベクトルの直交性を証明するまで延期しよう．

ブラ空間と内積

今迄取り扱ってきたベクトル空間はケット空間である．ここでケット空間と“対をなす”ベクトル空間として**ブラ空間**という概念を導入しよう．我々はあらゆるケット$|\alpha\rangle$に対し，$\langle\alpha|$と書かれる一つのブラがこの対をなす空間，すなわちブラ空間に存在することを要請する．ブラ空間は固有ケット$\{|a'\rangle\}$に対応する固有ブラ$\{\langle a'|\}$によって張られる．ケット空間とブラ空間には1対1の対応がある．すなわち

$$\begin{aligned}
&|\alpha\rangle \overset{\mathrm{DC}}{\leftrightarrow} \langle\alpha| \\
&\quad\vdots \\
&|a'\rangle,|a''\rangle,\ldots \overset{\mathrm{DC}}{\leftrightarrow} \langle a'|,\langle a''|,\ldots \\
&|\alpha\rangle+|\beta\rangle \overset{\mathrm{DC}}{\leftrightarrow} \langle\alpha|+\langle\beta|
\end{aligned} \tag{1.2.9}$$

といった対応であり，DCは**双対（そうつい）対応**（dual correspondence）をあらわす．荒っぽくいえばケット空間のある種の鏡像として，ブラ空間を見なすことができよう．

$c|\alpha>$ の対となるブラは$c^*<\alpha|$であるという要請もしよう．$c<\alpha|$ではない．これは非常に重要な点である．もっと一般に

$$c_\alpha|\alpha> + c_\beta|\beta> \overset{\text{DC}}{\leftrightarrow} c_\alpha{}^*<\alpha| + c_\beta{}^*<\beta| \tag{1.2.10}$$

とする．

ここでブラとケットとの**内積**を定義しておく*．積はブラが左にケットが右側にくるように書く．例えば

$$<\beta|\alpha> = \underset{\text{ブラ}}{(<\beta|)} \cdot \underset{\text{ケット}}{(|\alpha>)} \tag{1.2.11}$$

である．この積は一般に複素数である．内積を作るのにいつも一つのベクトルをブラ空間から，他の一つのベクトルをケット空間から取ってくることに注意しよう．

ここで内積の基本的な性質を2つ要請しよう．第1に

$$<\beta|\alpha> = <\alpha|\beta>^* \tag{1.2.12}$$

とする．つまり $<\beta|\alpha>$と$<\alpha|\beta>$は互いに複素共役である．内積はよく知られたスカラー積 $\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$ とある意味で類似しているが，$<\beta|\alpha>$ と $<\alpha|\beta>$ とははっきりと区別しなければならない．このような区別は実ベクトル空間では必要ない．$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$ は $\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}$ と等しいからである．(1.2.12) を使うと，$<\alpha|\alpha>$ が実数でなければならないことがすぐ推論できる．証明は$\beta\to\alpha$の置き換えを行えばよい．

---

* 他の本ではこの内積を，ユークリッド空間の $\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$ と類似しているので，よくスカラー積と呼ぶ．しかし本書ではスカラーという術語を，通常の3次元空間で回転不変な量を表わすためにとっておく．

内積に課する第2の要請は

$$<\alpha|\alpha> \ \geq \ 0 \tag{1.2.13}$$

である．等号が成立するのは，$|\alpha>$ が零ケットであるときのみとする．これは**正値計量**の要請といわれる．物理屋の観点からするとこの要請は，後に明らかになるように，量子力学の確率的解釈をする上で重要である*.

二つのケット $|\alpha>$ と $|\beta>$ は

$$<\alpha|\beta> = 0 \tag{1.2.14}$$

のとき，内積には定義上ブラ $<\alpha|$ が現われているが，互いに**直交している**という．直交関係（1.2.14）は，（1.2.12）を通じて

$$<\beta|\alpha> = 0 \tag{1.2.15}$$

をも意味する．

零ケットでないケットが与えられれば，**規格化されたケット** $|\tilde{\alpha}>$ を

$$|\tilde{\alpha}> = \left(\frac{1}{\sqrt{<\alpha|\alpha>}}\right)|\alpha> \tag{1.2.16}$$

によって作ることができ

$$<\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}> = 1 \tag{1.2.17}$$

となる．$\sqrt{<\alpha|\alpha>}$ は広く一般に $|\alpha>$ の**ノルム**と呼ばれ，ユークリッド・ベクトル空間でいえばベクトルの大きさ $\sqrt{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}} = |\boldsymbol{a}|$ に対応する．$|\alpha>$ と $c|\alpha>$ は同じ物理状態をあらわすから，物理状態として用いるケットは（1.2.17）のように規格化されていると要求してよい**.

---

* この要請を放棄する試みから“不定値計量”を用いる物理理論が生まれた．しかしそうした理論は本書で扱わない．

** 連続スペクトルを持つ観測量の固有ケットに対しては，異なった規格化のとりきめが用いられる．1.6節を参照．

演　算　子

前に指摘したように，運動量やスピン成分といった観測量は，ケットにかかる演算子によって表わされる．ケットに作用するさらに一般的なクラスの演算子を考えることができる．これらを X，Y などと記し，観測量に対応する限られたクラスの演算子には，A，B などの記号を用いる．

演算子は左側からケットに作用し

$$X\cdot(|\alpha\rangle)=X|\alpha\rangle, \tag{1.2.18}$$

その結果はもとと異なるケットになる．演算子 X と Y が**等しい**

$$X=Y \tag{1.2.19}$$

といわれるのは，問題にしているケット空間の任意のケット $|\alpha\rangle$ に対して

$$X|\alpha\rangle=Y|\alpha\rangle \tag{1.2.20}$$

であるときである．任意のケット $|\alpha\rangle$ に対して

$$X|\alpha\rangle=0 \tag{1.2.21}$$

が成り立つとき，演算子 X は**零演算子**といわれる．

演算子は加えることができる．加法操作は交換でき，また結合できる．すなわち

$$X+Y=Y+X, \tag{1.2.21a}$$

$$X+(Y+Z)=(X+Y)+Z \tag{1.2.21b}$$

が成立する．第4章で考察する時間反転の演算子を例外として，本書に現われる演算子はすべて線形である．すなわち

$$X(c_\alpha|\alpha\rangle+c_\beta|\beta\rangle)=c_\alpha X|\alpha\rangle+c_\beta X|\beta\rangle \tag{1.2.22}$$

が成り立つ．

演算子 X はブラに常に右側から作用して

$$(\langle\alpha|)X = \langle\alpha|X, \tag{1.2.23}$$

その結果はもとと異なるブラになる．ケット $X|\alpha\rangle$ とブラ $\langle\alpha|X$ は一般に互いに対とはならない．そこで $X^\dagger$ で表わされる演算子を

$$X|\alpha\rangle \overset{\text{DC}}{\leftrightarrow} \langle\alpha|X^\dagger \tag{1.2.24}$$

で定義し，X の**エルミート共役**又は単に共役と呼ぶ．もし

$$X = X^\dagger \tag{1.2.25}$$

ならば X はエルミートであるという．

演算子の積

演算子 X と Y はかけあわすことができるが，一般に積の演算は交換できない．すなわち

$$XY \neq YX \tag{1.2.26}$$

である．しかし積の演算は結合することができて

$$X(YZ) = (XY)Z = XYZ \tag{1.2.27}$$

が成り立つ．また

$$X(Y|\alpha\rangle) = (XY)|\alpha\rangle = XY|\alpha\rangle,$$
$$(\langle\beta|X)Y = \langle\beta|(XY) = \langle\beta|XY \tag{1.2.28}$$

が成り立つ．ここで次式の成り立つことに注目しよう：

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger. \tag{1.2.29}$$

証明は

$$XY|\alpha> = X(Y|\alpha>) \overset{\mathrm{DC}}{\leftrightarrow} (<\alpha|Y^\dagger)X^\dagger = <\alpha|Y^\dagger X^\dagger \qquad (1.2.30)$$

より明らかである．

今迄考えてきた積は$<\beta|\alpha>$，$X|\alpha>$，$<\alpha|X$，およびXYといった種類のものであった．他に我々の作れる演算子の積はないであろうか．$|\beta>$と$<\alpha|$をこの順序でかけてみよう．その結果の積

$$(|\beta>)\cdot(<\alpha|) = |\beta><\alpha| \qquad (1.2.31)$$

は$|\beta>$と$<\alpha|$の**外積**と呼ばれている．この$|\beta><\alpha|$が演算子とみなされることを，すぐ後で強調する．したがって外積は単なる数である内積とは根本的に違う．

“規則に合わない積”もある．既に述べたように，演算子はケットの左側に，ブラなら右側にこなければならない．すなわち$|\alpha>X$や$X<\alpha|$は規則に合わない積の例である．これらはケットでもブラでも，また，演算子でもない．ただ意味のないものである．$|\alpha>$と$|\beta>$（$<\alpha|$と$<\beta|$）が同じケット（ブラ）空間に属すとき，$|\alpha>|\beta>$や$<\alpha|<\beta|$といった積はやはり間違いになる*．

結合の公理

(1.2.27) から明らかなように，演算子同志の積の演算は結合できる．実際，この結合性は，ケット，ブラおよび演算子間の“規則にあった”積をあつかう限り，極めて一般的に成立すると仮定される．ディラックはこの重要な仮定を**掛け算の結合の公理**と呼んだ．

* この本の後の方で$|\alpha>|\beta>$といった積が出てくる．もっと適切に表わすと$|\alpha>\otimes|\beta>$であるが，この時$|\alpha>$と$|\beta>$は常に異なったベクトル空間のケットである．例えば，第1のケットは電子スピンの，第2のケットは電子の軌道角運動量のベクトル空間に属している．あるいは，はじめのは粒子1の，次のは粒子2のベクトル空間のケットである，といった具合である．

この公理の効力を示すために，まずケットに外積を作用させたときのことを考えよう：

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|)\cdot|\gamma\rangle. \tag{1.2.32}$$

結合の公理から，これを

$$|\beta\rangle\cdot(\langle\alpha|\gamma\rangle) \tag{1.2.33}$$

とも見なせる．ここで $\langle\alpha|\gamma\rangle$ は単なる数である．したがって外積はケットに作用して，別のケットをつくる．つまり $|\beta\rangle\langle\alpha|$ を一つの演算子とみなせる．(1.2.32) と (1.2.33) は等しいので，ドットを省き $|\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle$ を用いて $|\gamma\rangle$ に演算子 $|\beta\rangle\langle\alpha|$ がかかっていることを，あるいは同値であるが $|\beta\rangle$ に数 $\langle\alpha|\gamma\rangle$ がかかっていることを表わせる．(一方，もし (1.2.32) を $(\langle\alpha|\gamma\rangle)\cdot|\beta\rangle$ と書いたなら，不合理な表現と間違えないためにドットとかっこを省く訳にはいかない．) 演算子 $|\beta\rangle\langle\alpha|$ は，ベクトル $|\gamma\rangle$ を $|\beta\rangle$ の方向に回転させることに注意しよう．また，もし

$$X = |\beta\rangle\langle\alpha| \tag{1.2.34}$$

ならば

$$X^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta| \tag{1.2.35}$$

であることが容易に分かる．これは演習問題として残しておこう．

結合の公理の第 2 の重要な例証として

$$\underset{\text{ブラ}}{(\langle\beta|)}\cdot\underset{\text{ケット}}{(X|\alpha\rangle)} = \underset{\text{ブラ}}{(\langle\beta|X)}\cdot\underset{\text{ケット}}{(|\alpha\rangle)} \tag{1.2.36}$$

に注目する．両辺は等しいのでもっと簡潔な記法

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle \tag{1.2.37}$$

を使って (1.2.36) の各辺を表わしてよい．ここで $\langle\alpha|X^\dagger$ が $X|\alpha\rangle$ と対に

なるブラであることを思い出すと

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\beta|\cdot(X|\alpha\rangle) = \{(\langle\alpha|X^{\dagger})\cdot|\beta\rangle\}^{*}$$
$$= \langle\alpha|X^{\dagger}|\beta\rangle^{*} \qquad (1.2.38)$$

が導ける．ここで結合の公理に加えて内積の基本的性質（1.2.12）を用いた．エルミート的な X に対しては

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\alpha|X|\beta\rangle^{*} \qquad (1.2.39)$$

が成立する．

1.3 基底ケットと行列表現

観測量の固有ケット

エルミート演算子 A の固有ケットと固有値を考えよう．A という，以前に観測量のためにとっておいた記号を用いる．量子力学に出てくる重要なエルミート演算子はたいてい，ある物理量を表わす演算子になっているからである．

定理 エルミート演算子 A の固有値は実数である．また異なる固有値に属する A の固有ケットは，たがいに直交する．

証明 はじめに

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \qquad (1.3.1)$$

であることを思い出そう．A はエルミートであるから

$$\langle a''|A = a''^{*}\langle a''| \qquad (1.3.2)$$

も成り立つ．ここで a'，a''，…は A の固有値である．(1.3.1)の両辺に左から

$<a''|$をかけ，(1.3.2) の両辺に右側から$|a'>$をかけて，差をとると

$$(a'-a''^*)<a''|a'>=0 \qquad (1.3.3)$$

が得られる．今 a' と a'' とは等しいか異なるかのどちらかであるが，まず等しいと仮定しよう．すると実数条件（定理の前半）

$$a'=a'^* \qquad (1.3.4)$$

が，$|a'>$ が零ケットではないことから出てくる．次に a' と a'' とが異なると仮定しよう．今証明した実数条件から，(1.3.3) にある $a'-a''^*$ は $a'-a''$ に等しい．仮定よりこれはゼロではないから，内積 $<a''|a'>$ がゼロとならなければならない：

$$<a''|a'>=0,\ (a'\neq a''). \qquad (1.3.5)$$

これで直交性（定理の後半）が証明された．　□

物理的根拠から，観測量は実の固有値を持つことが期待される．この点は次節で量子力学での観測の議論をするとき，もっとはっきりするだろう．いま証明した定理は，演算子がエルミートなら常に実固有値を持つことを保証する．量子力学でエルミート的な観測量を扱うのは，このためである．

$|a'>$を規格化して，$\{|a'>\}$が**規格直交**系

$$<a''|a'>=\delta_{a''a'} \qquad (1.3.6)$$

をつくるようにするのが普通である．ところで一体，この固有ケットの集合は完全系になっているだろうか．我々はそもそも初めから，このケット空間全体が A の固有ケットで張られるものと要請していた．それゆえ A の固有ケットは我々のケット空間の構成上，完全系を作っていなければならない*.

＊ 既に波動力学に通じている鋭敏な読者は，ここで用いた固有関数の完備性は，シュレーディンガー方程式にシュトルム・リューヴィュの理論を適用して証明できると指摘されるかも知れない．しかし，基本的仮定にさかのぼってシュレーディンガー方程式を“導き出す”ためには，位置の固有ケットの完備性を仮定しなければならないのである．

基底ケットとしての固有ケット

上に示したように A の規格化された固有ケットは，完備規格直交系を作る．ケット空間の任意のケットは，A の固有ケットで展開できる．すなわち，ちょうどユークリッド空間で互いに直交する単位ベクトルの組を基底ベクトルに用いるように，A の固有ケットは基底ケットとして用いられる．

A の固有ケットで張られるケット空間内の任意のケット $|\alpha>$ をとり

$$|\alpha> = \sum_{a'} c_{a'} |a'> \tag{1.3.7}$$

のように展開してみよう．左側から $<a''|$ をかけ規格直交性（1.3.6）を用いると，すぐに展開係数が

$$c_{a'} = <a'|\alpha> \tag{1.3.8}$$

と分かる．すなわち

$$|\alpha> = \sum_{a'} |a'><a'|\alpha> \tag{1.3.9}$$

であり，これは(実)ユークリッド空間内のベクトル $\boldsymbol{V}$ の展開

$$\boldsymbol{V} = \sum_i \hat{\boldsymbol{e}}_i \,(\hat{\boldsymbol{e}}_i \cdot \boldsymbol{V}) \tag{1.3.10}$$

と類似している．ここで $\{\hat{\boldsymbol{e}}_i\}$ は単位ベクトルの直交系である．ここで掛け算の結合の公理を思い出そう．$|a'><a'|\alpha>$ は $|a'>$ に数 $<a'|\alpha>$ がかかっているとも，$|\alpha>$ に演算子 $|a'><a'|$ が作用しているとも見ることができる．（1.3.9）の $|\alpha>$ は任意のケットだから，

$$\sum_{a'} |a'><a'| = 1 \tag{1.3.11}$$

が成り立たなければならない．この右辺の1は恒等演算子とみなされる．等式（1.3.11）は**完備関係式**あるいは**閉包**（**クロージャー**）と呼ばれている．

(1.3.11) の有用性はいくら強調しても強調しすぎることがない．正しい順序でかけられた，ケットや演算子やブラの一連の積が与えられたとき，どこでも都合のよい場所に (1.3.11) の形で恒等演算子を挿入してよい．例えば $<\alpha|\alpha>$ を考えよう．$<\alpha|$ と $|\alpha>$ の間に恒等演算子を入れると

$$<\alpha|\alpha> = <\alpha|\cdot(\sum_{a'}|a'><a'|)\cdot|\alpha> = \sum_{a'}|<a'|\alpha>|^2 \quad (1.3.12)$$

が得られる．そしてまたこの式は，もし $|\alpha>$ が規格化されているとしたら (1.3.7) の展開係数が

$$\sum_{a'}|c_{a'}|^2 = \sum_{a'}|<a'|\alpha>|^2 = 1 \quad (1.3.13)$$

を満足しなければならないことを示している．

(1.3.11) にある $|a'><a'|$ に着目しよう．これは外積であるから一つの演算子であるに違いない．$|\alpha>$ に作用させると

$$(|a'><a'|)\cdot|\alpha> = |a'><a'|\alpha> = c_{a'}|a'> \quad (1.3.14)$$

となる．$|a'><a'|$ には，ケット $|\alpha>$ から $|a'>$ に平行な成分を選び出す働きがあることが分かる．そのため $|a'><a'|$ は基底ケット $|a'>$ への**射影演算子**と呼ばれ，Λ_{α} で表わされる．すなわち

$$\Lambda_{a'} \equiv |a'><a'| \quad (1.3.15)$$

であり，完備関係式 (1.3.11) は

$$\sum_{a'}\Lambda_{a'} = 1 \quad (1.3.16)$$

と書くことができる．

行列表現

基底ケットを指定した上で，演算子例えば X を正方行列で表わす方

法を示そう．まず（1.3.11）を2度使って，演算子 X を

$$X=\sum_{a''}\sum_{a'}|a''><a''|X|a'><a'| \tag{1.3.17}$$

のように書く．ケット空間の次元を N とすると，全部で N^2 個の $<a''|X|a'>$ の因子がある．これらを $N\times N$ の正方行列に，行と列の指標が

$$<\underset{\text{行}}{a''}|X|\underset{\text{列}}{a'}> \tag{1.3.18}$$

となるように並べよう．具体的に書くと行列表現は

$$X \doteq \begin{pmatrix} <a^{(1)}|X|a^{(1)}> & <a^{(1)}|X|a^{(2)}> & \cdots\cdots \\ <a^{(2)}|X|a^{(1)}> & <a^{(2)}|X|a^{(2)}> & \cdots\cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{1.3.19}$$

となる．ここで≐の記号は“表現される”ことを意味する*.

ここで（1.2.38）を使うと，

$$<a''|X|a'>=<a'|X^\dagger|a''>^* \tag{1.3.20}$$

と書ける．以上により，もともと（1.2.24）で定義されたエルミート共役の演算は，転置複素共役という（おそらくもっとなじみのある）言葉と関連づけられる．もし演算子 B がエルミート的であると，

$$<a''|B|a'>=<a'|B|a''>^* \tag{1.3.21}$$

が成り立つ．

この方法で $<a''|X|a'>$ を正方行列に並べると，行列の積についての通常の規則が適用できる．このことは演算子の関係式

---

* ここで等号記号は用いない．行列表現の形は，何を基底ケットに選んだかに依存するからである．女優がポスターの中の女優と違うように演算子は演算子の表現とは異なる．

$$Z = XY \tag{1.3.22}$$

の行列表現が

$$\begin{aligned} <a''|Z|a'> &= <a''|XY|a'> \\ &= \sum_{a'''} <a''|X|a'''> <a'''|Y|a'> \end{aligned} \tag{1.3.23}$$

となることに気付くとすぐ分かる．ここで行ったのは，単にまた (1.3.11) の形に書いた恒等演算子を，X と Y の間に挿入しただけのことである！

ここで基底ケットを用いて，ケットの関係式

$$|\gamma> = X|\alpha> \tag{1.3.24}$$

がどのように表わされるかを調べよう．$|\gamma>$ の展開係数は，左から $<a'|$ をかけて

$$\begin{aligned} <a'|\gamma> &= <a'|X|\alpha> \\ &= \sum_{a''} <a'|X|a''><a''|\alpha> \end{aligned} \tag{1.3.25}$$

のように得られる．$|\alpha>$ と $|\gamma>$ の展開係数を列の形に

$$|\alpha> \doteq \begin{pmatrix} <a^{(1)}|\alpha> \\ <a^{(2)}|\alpha> \\ <a^{(3)}|\alpha> \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |\gamma> \doteq \begin{pmatrix} <a^{(1)}|\gamma> \\ <a^{(2)}|\gamma> \\ <a^{(3)}|\gamma> \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{1.3.26}$$

のように並べておくと，上の式は列ベクトルに X の正方行列を規則通りにかけたものとみなせる．同じように，与えられた

$$<\gamma| = <\alpha|X \tag{1.3.27}$$

に対して右から $|a'>$ をかけると

$$<\gamma|a'> = \sum_{a''} <\alpha|a''> <a''|X|a'> \tag{1.3.28}$$

が得られる．すなわちブラは行ベクトル

$$
\begin{aligned}
<\gamma| &\doteq (<\gamma|a^{(1)}>,\ <\gamma|a^{(2)}>,\ <\gamma|a^{(3)}>,\ \ldots\ ) \\
&= (<a^{(1)}|\gamma>^*,\ <a^{(2)}|\gamma>^*,\ <a^{(3)}|\gamma>^*,\ \ldots\ )
\end{aligned}
\tag{1.3.29}
$$

で表現できる．行ベクトルの要素を（1.3.26）の要素のように書くと，複素共役が現われることに注意しよう．一方，内積 $<\beta|\alpha>$ は $<\beta|$ をあらわす行ベクトルと $|\alpha>$ をあらわす列ベクトルの行列としての積として

$$
\begin{aligned}
<\beta|\alpha> &= \sum_{a'} <\beta|a'>\ <a'|\alpha> \\
&= (<a^{(1)}|\beta>^*,\ <a^{(2)}|\beta>^*,\ \cdots) \begin{pmatrix} <a^{(1)}|\alpha> \\ <a^{(2)}|\alpha> \\ \vdots \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{1.3.30}
$$

のように書ける．この表式とちょうど複素共役のものが，$<\alpha|$ を表現する行ベクトルと $|\beta>$ をあらわす列ベクトルをかけると得られる．すなわち内積の基本的性質（1.2.12）と合致する．最後に外積 $|\beta><\alpha|$ の行列表現を作ると

$$
|\beta><\alpha| \doteq \begin{pmatrix} <a^{(1)}|\beta><a^{(1)}|\alpha>^* & <a^{(1)}|\beta><a^{(2)}|\alpha>^* & \cdots \\ <a^{(2)}|\beta><a^{(1)}|\alpha>^* & <a^{(2)}|\beta><a^{(2)}|\alpha>^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}
\tag{1.3.31}
$$

が容易に得られる．

観測量 A の行列表現は，A そのものの固有ケットを基底ケットに選べば特に簡単になる．まず

$$
A = \sum_{a''} \sum_{a'} |a''><a''|A|a'><a'|
\tag{1.3.32}
$$

と書けるが，正方行列 $<a''|A|a'>$ は明らかに対角型なので

$$
<a''|A|a'> = <a'|A|a'>\delta_{a'a''} = a'\delta_{a'a''}
\tag{1.3.33}
$$

となるから

$$A = \sum_{a'} a' |a'><a'| = \sum_{a'} a' \Lambda_{a'} \qquad (1.3.34)$$

が得られる．

スピン 1/2 の系

ここで特別な例として，スピン1/2の系を考えるのは教育的である．用いる基底ケット，$|S_z;\pm>$ を簡単のために $|\pm>$ と書こう．$|\pm>$ で張られるケット空間の最も簡単な演算子は恒等演算子であって，(1.3.11) を使うと

$$1 = |+><+| + |-><-| \qquad (1.3.35)$$

と書ける．(1.3.34) に従えば，S_zを

$$S_z = \hbar/2 \left[|+><+| - |-><-| \right] \qquad (1.3.36)$$

と書くことができる．$|\pm>$ の規格直交性から，ただちに固有ケットと固有値の関係式

$$S_z|\pm> = \pm(\hbar/2)|\pm> \qquad (1.3.37)$$

が導ける．

他の二つの非エルミート的な演算子

$$S_+ \equiv \hbar|+><-|, \quad S_- \equiv \hbar|-><+| \qquad (1.3.38)$$

に注目することも教育的である．演算子 S_+は下向きスピン・ケット$|->$ に作用すると，これを$\hbar|+>$ に変える．一方上向きスピン・ケット$|+>$ にS_+が作用すると零ケットになる．したがって S_+の物理的役割は，スピン成分を $\hbar$ の単位で一つだけ増やすことである．もしスピン成分をもうそれ以上増や

すことのできない場合には，自動的に零ケットが得られる．これと同じように S_- はスピン成分を $\hbar$ だけ少くする演算子と解釈できる．後に $S\pm$ が $S_x \pm iS_y$ と書かれることを示そう．

角運動量の行列表現を作るときには，列（行）の要素を角運動量成分の大きい順にならべるのが普通である．すなわち最初の欄には角運動量成分の最大のものが，二番目の欄には次に大きいものがといった具合である．スピン1/2という特別な場合には

$$|+> \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |-> \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{1.3.39a}$$

$$S_z \doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad S_+ \doteq \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- \doteq \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.3.39b}$$

となる．第3章でパウリの二成分形式を議論するとき，この具体的な表現にもう一度触れる．

1.4　測定，観測量および不確定関係

測　　定

ケット空間の数学について説明を終えたので，これから測定過程の量子論の議論にかかろう．これは初心者にとって余り容易な問題でないので，まず手引きとして偉人 P. A. M. ディラックの言葉を引用しよう．(Dirac 1958, p. 36)：“測定をすると，いつも系は測定された力学変数の一つの固有状態に跳び移る．”一体この言葉は何を意味するのだろうか．我々はディラックの言葉を次のように解釈する．観測量 A の測定前に，系はある線形結合

$$|\alpha> = \sum_{a'} c_{a'}|a'> = \sum_{a'}|a'><a'|\alpha> \tag{1.4.1}$$

であらわされる状態にあったとしよう．測定がなされると系は観測量 A の一

つの固有状態，例えば $|a'>$ に“跳び移る”のである．すなわち

$$|\alpha> \xrightarrow{\text{A の測定}} |a'> \tag{1.4.2}$$

と書ける．例えばスピンが任意の方向を向いた銀原子は，SG$\hat{z}$型のSG装置を通ると $|S_z;+>$ 又は $|S_z;->$ のどちらかの状態になるのである．すなわち測定は普通，状態を変える．唯一の例外は，系が既に測定される観測量の一つの固有状態にあるときで，このときは後に述べるように確実に

$$|a'> \xrightarrow{\text{A の測定}} |a'> \tag{1.4.3}$$

となる．測定が $|\alpha>$ を $|a'>$ に変えたとき，A が a' であることが測定されたという．この意味で測定の結果，測定される観測量の一つの固有値が得られるという．

測定前の物理系の状態ケットが (1.4.1) で与えられたとき，測定の結果，系が様々な $|a'>$ の中のどの状態になるかはあらかじめ分からない．しかしながら，ある特別な状態 $|a'>$ へ跳び移る確率は

$$a' \text{の確率} = |<a'|\alpha>|^2 \tag{1.4.4}$$

であると仮定しよう．ここで $|\alpha>$ は規格化されているとする．

今迄の話は一つの物理系についてであったが，確率 (1.4.4) を経験的に決めるにはすべて同一ケット $|\alpha>$ で特徴づけられる，あらかじめ全く同じように準備した物理系の集合，すなわちアンサンブルに対して何回も測定することを考えなければならない．このようなアンサンブルは**純粋アンサンブル**と呼ばれている．(アンサンブルに関してはさらに第3章で述べる．) 例として図1.3のSG$\hat{z}$装置を通過して生き残った銀原子線を考えよう．S_z- 成分は阻止されており構成原子はすべて $|S_z;+>$ の状態にあるので，これは純粋アンサンブルの一例である．

内積の二乗 $|<a'|\alpha>|^2$ に確率的解釈 (1.4.4) を与えることは量子力学の基本的仮定の一つである．したがってこれは証明できない．しかしこの

解釈が理にかなっていることを極端な場合に示そう．測定前の状態ケットが $|a'>$ 自身であったとしよう．すると（1.4.4）によると，測定の結果，a' を得る確率，――もっと正確には，$|a'>$ に移る確率――は1と予言できる．期待どうりである．もう一度 A を測ってももちろん $|a'>$ が得られる．きわめて一般的に，おなじ観測量の測定を引き続いてくりかえしてもおなじ結果が得られる*．一方，はじめ $|a'>$ で特徴づけられている系が，他のある固有ケット $|a''>$（ここで $a'' \neq a'$）に移る確率を問えば，（1.4.4）により $|a'>$ と $|a''>$ との直交性からゼロとなる．測定理論の立場では，直交するケットは互いに排他的な状態に対応する．例えばスピン1/2の系が $|S_z;+>$ にあったとすると，確実に $|S_z;->$ にはない．

きわめて一般的に，何かある事象の起る確率は負であってはならない．さらに，選択可能な様々な事像の確率を加え合わすと1にならなければならない．この二つの期待を（1.4.4）の確率の仮定は満たしている．

ここで状態が $|\alpha>$ であるときの A の**期待値**を

$$<A> \equiv <\alpha|A|\alpha> \tag{1.4.5}$$

で定義する．状態 $|\alpha>$ を明確にするために $<A>_\alpha$ という記号もときどき用いられる．（1.4.5）は定義であるが，これを

$$\begin{aligned} <A> &= \sum_{a'}\sum_{a''} <\alpha|a''><a''|A|a'><a'|\alpha> \\ &= \sum_{a'} \underset{\text{測定値 } a'}{\underset{\uparrow}{a'}} \quad \underbrace{|<a'|\alpha>|^2}_{a' \text{を得る確率}} \end{aligned} \tag{1.4.6}$$

と書くことができるので，平均測定値という直観的概念と一致する．固有値と期待値とを決して混同してはならない．例えばスピン1/2の系の S_z の期待値は $-\hbar/2$ と $\hbar/2$ の間のどのような実数値，例えば $0.273\hbar$ でも取りうる．これと

* ここで，引き続く測定はただちに行わなければならない．この点は第2章で状態ケットの時間変化を議論するとき，はっきりとなるであろう．

対照的に，S_z の固有値は $\hbar/2$ と $-\hbar/2$ のただ二つの値のみを取る．

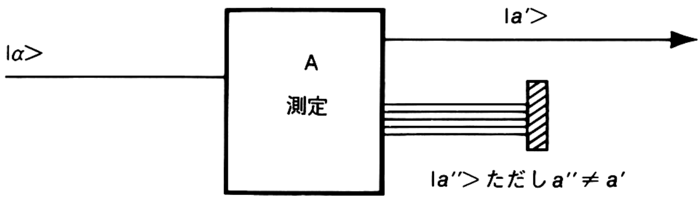


図 1.6.　選択的測定

量子力学での測定の意味をさらに明らかにするために，**選択的測定**，ないし沪過法という概念を導入しよう．第1.1節でシュテルン・ゲルラッハの配置として，ただ一つのスピン成分を装置から通過させ，他の成分はすっかり止めてしまうものを考えた．さらに一般的に，A の固有ケットの中のただ一つ，例えば $|a'>$ のみを選択し他はすべて阻止する装置を備えた測定過程を想像しよう．図1.6を見よ．これが選択的測定と呼ぶものである．これはまた，A の固有ケットの一つだけが試錬をくぐり抜けるので沪過法とも呼ばれる．数学的に述べれば，選択的測定とは $|\alpha>$ に射影演算子 Λ_{α} をかけること，つまり

$$\Lambda_{\alpha}|\alpha> = |a'><a'|\alpha> \qquad (1.4.7)$$

に相当する．

J. シュウィンガーは選択的測定を徹底的に調べあげ，それを基に量子力学の形式を発展させている．彼はまず，我々の記法では Λ_{α} すなわち $|a'><a'|$ と一致する測定の記号 $M(a')$ を導入し，種々のシュテルン・ゲルラッハ型実験の結果を検討することによって $M(a')$（および $|b'><a'|$ に対応する $M(b',a')$）の数多くの性質を演繹した．こうして彼はケット，ブラおよび演算子を扱う数学をすべて導出している．本書ではシュウィンガーのとった径はたどらない．興味ある読者はゴットフリードの本（Gottfried 1966, pp. 192-9）を

参照されたい.

スピン 1/2 の系の再考

観測量の一般的議論に進む前に，もう一度スピン1/2の系を考えよう．ここで示すのは，一続きのシュテルン・ゲルラッハの実験結果と今迄述べてきた量子力学の基本的仮定とを組み合わせると，S_x，S_y の固有ケットである $|S_x;\pm>$ および $|S_y;\pm>$ ばかりでなく，演算子 S_x，S_y そのものまで十分に決められるということである.

初めに S_x+ の粒子線が SG$\hat{z}$ 型の装置を通ると，線が等強度の二つの成分に分かれることを思い出そう．このことから S_x+ 状態が $|S_z;\pm>$（単に $|\pm>$ と記す）に移る確率はそれぞれ 1/2 であることが分かる．このことから

$$|<+|S_x;+>|=|<-|S_x;+>|=\frac{1}{\sqrt{2}} \tag{1.4.8}$$

が成り立つ．したがって S_x+ のケットを δ_1 を実数として

$$|S_x;+>=\frac{1}{\sqrt{2}}|+>+\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}|->\tag{1.4.9}$$

のように構成することができる.（1.4.9）を書くとき，状態ケットの全体の位相（$|+>$ にも $|->$ にも共通の位相）は重要でないという事実を用いた．$|+>$ の係数は通例では，正の実数に選ばれる．S_x+ と S_x- は二者択一の関係にあるから，S_x- のケットは S_x+ ケットと直交していなければならない．この直交性の要請から

$$|S_x;->=\frac{1}{\sqrt{2}}|+>-\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}|->\tag{1.4.10}$$

が導かれる．ここでも $|+>$ の係数を慣習にしたがい正の実数に選んだ．すると(1.3.34）を用いて演算子 S_x を次のように作り上げることができる：

$$S_x = \frac{\hbar}{2}[(|S_x;+><S_x;+|) - (|S_x;-><S_x;-|)]$$
$$= \frac{\hbar}{2}[e^{-i\delta_1}(|+><-|) + e^{i\delta_1}(|-><+|)]. \tag{1.4.11}$$

こうして作った S_x は，当然エルミート的になっていることに注意しよう．S_x を S_y に代えて同じように議論すると

$$|S_y;\pm> = \frac{1}{\sqrt{2}}|+> \pm \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_2}|->, \tag{1.4.12}$$
$$S_y = \frac{\hbar}{2}[e^{-i\delta_2}(|+><-|) + e^{i\delta_2}(|-><+|)] \tag{1.4.13}$$

が導ける．

δ_1 と δ_2 とを決める方法があるだろうか．実際，未だ使っていない情報が一つある．z-方向に進むスピン 1/2 の粒子線があるとしよう．SG$\hat{\boldsymbol{x}}$ の後に SG$\hat{\boldsymbol{y}}$ が来る一続きのシュテルン・ゲルラッハの実験を考えよう．こうした実験の結果は前に（1.4.8）を導いた場合と全く類似していて

$$|<S_y;\pm|S_x;+>| = |<S_y;\pm|S_x;->| = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{1.4.14}$$

となる．物理系が回転不変であるという観点からすれば当然であろう．（1.4.10）と（1.4.12）を（1.4.14）に代入すると

$$\frac{1}{2}|1 \pm e^{i(\delta_1-\delta_2)}| = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{1.4.15}$$

が得られるが，これは

$$\delta_2 - \delta_1 = \frac{\pi}{2} \qquad \text{または} \quad -\frac{\pi}{2} \tag{1.4.16}$$

であれば満足される．こうして S_x と S_y の行列要素がすべて実数ではあり得ないということが分かる．もし S_x の行列要素が実数なら S_y の行列要素は純虚数でなければならない（その逆もまた同様）．この極めて簡単な例から，複素数の導入が量子力学の本質的特徴であることが分かる．S_x の行列要素を実

数に選び* $\delta_1=0$ と置くのが便利である．（もし $\delta_1=\pi$ と選んだなら，x-軸の正方向が逆を向くことになる．）このとき第2の位相角 δ_2 は $-\frac{\pi}{2}$ か $\frac{\pi}{2}$ となる．この種のあいまいさが残るのは不思議でない．用いる座標系が右手系か左手系かを，まだ指定していなかったからである．x-軸および z-軸を与えたとしても，y-軸の正方向を選ぶのになお2通りのあいまいさがある．あとで右手系を用いて，回転の生成演算子として角運動量を議論する．その時になったら $\delta_2=\frac{\pi}{2}$ が正しい選択であることを示せるであろう．

要約すると

$$|S_x;\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle\pm\frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle, \tag{1.4.17a}$$

$$|S_y;\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle\pm\frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle \tag{1.4.17b}$$

および

$$S_x=\frac{\hbar}{2}[(|+\rangle\langle-|)+(|-\rangle\langle+|)], \tag{1.4.18a}$$

$$S_y=\frac{\hbar}{2}[-i(|+\rangle\langle-|)+i(|-\rangle\langle+|)] \tag{1.4.18b}$$

である．ここで与えられた $S_x\pm$ と $S_y\pm$ の固有ケットは，以前，直線および円偏光との類推に基づいて推測した結果，(1.1.9) と (1.1.14) とに一致している．（この比較で物理的に意味のあるのは，$|+\rangle$ と $|-\rangle$ との間の相対的位相のみであることに注意せよ）．また (1.3.38) で定義された非エルミート的な $S_\pm$ 演算子を，ここで

$$S_\pm=S_x\pm iS_y \tag{1.4.19}$$

と書くことができる．

---

* $|+\rangle$ および $|-\rangle$ の定義に含まれる任意の位相因子を適当に調節することにより，これはいつでも可能である．この点は，第3章で $|\pm\rangle$ が回転を受けたときのふるまいを議論するとき，さらに明らかになる．

演算子 S_x と S_y および以前与えた S_z は，交換関係

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar S_k \tag{1.4.20}$$

および反交換関係

$$\left\{S_i, S_j\right\} = \frac{1}{2}\hbar^2\delta_{ij} \tag{1.4.21}$$

を満たすことが容易に示せる．ここで交換子 [,] ならびに反交換子 $\left\{\ ,\ \right\}$ は

$$[A, B] \equiv AB - BA, \tag{1.4.22a}$$

$$\left\{A, B\right\} \equiv AB + BA \tag{1.4.22b}$$

によって定義される．交換関係（1.4.20）は，角運動量の交換関係の最も簡単な具体例であることがのちに分かるであろう．第 3 章で詳しくその意味を議論する．対照的に，反交換関係（1.4.21）はスピン1/2の系の特別な性質である．

演算子 $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{S}$，略記して $\boldsymbol{S}^2$ もまた

$$\boldsymbol{S}^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 \tag{1.4.23}$$

によって定義できる．(1.4.21) のため，この演算子は単に恒等演算子の定数倍

$$\boldsymbol{S}^2 = \left(\frac{3}{4}\right)\hbar^2 \tag{1.4.24}$$

になっている．明らかに

$$[\boldsymbol{S}^2, S_i] = 0 \tag{1.4.25}$$

である．第 3 章で示すように $\frac{1}{2}$ より大きなスピンに対して，$\boldsymbol{S}^2$ はもはや恒等演算子の倍数ではない．しかし（1.4.25）はやはり成り立つ．

両立できる観測量

ここで一般形式に戻り，両立できる観測量と両立できない観測量を対比させながら議論しよう．観測量 A, B は，対応する演算子が交換するとき，すなわち

$$[A, B] = 0 \tag{1.4.26}$$

が成立つとき**両立できる**と，また

$$[A, B] \neq 0 \tag{1.4.27}$$

のとき，**両立できない**と定義される．例えば $\mathbf{S}^2$ と S_z は両立できる観測量であり，一方 S_x と S_y は両立できない観測量である．

最初に両立できる観測量A, B の場合を考えよう．いつものように，ケット空間が A の固有ケットで張られていると仮定する．同じ空間を B の固有ケットで張られているものとも見なせるであろう．そこで問題は，A と B が両立できる観測量のとき，A の固有ケットは B の固有ケットとどんな関係にあるかである．

この質問に答える前に，以前は避けて通って来た非常に重要な点に触れなければならない．それは**縮退**という概念である．仮に A の一次独立な二つ（またはそれ以上）の固有ケットが同じ固有値を持っているとしよう．このとき二つの固有ケットの固有値は**縮退している**という．このような場合 $|a'\rangle$ の記号を用い固有値のみで固有ケットを分類しても，完全な記述にはならない．さらに，異なる固有ケットの直交性に関する以前述べた定理が，縮退のないことを仮定して証明されていたことを思い出してみよう．もっと具合の悪いことに，ケット空間の次元が A の異なる固有値の数より大きい時，ケット空間が $\{|a'\rangle\}$ で張られるという考え方全体が困難に陥いってしまう．幸いなことに，量子力学を実際に適用するとき，普通こんな場合には何か別の交換する演算子例えば B が，縮退している固有ケットの分類に使えるのである．

ここで重要な定理を述べることが出来る．

定理　A と B が両立できる観測量であり，A の固有値は縮退していないとする．このとき行列要素 $< a''|B|a' >$ はすべて対角型である．（ここで $\{|a' >\}$ を基底ケットに用いると A の行列要素は既に対角型であることを思い出せ．）

証明　この重要な定理の証明は極めて簡単である．両立できる観測量の定義（1.4.26）を用いると

$$< a''|[A,B]|a' > = (a'' - a') < a''|B|a' > = 0 \tag{1.4.28}$$

である．したがって $<a''|B|a' >$ は $a' = a''$ でない限りゼロとなる．よって定理は証明された．□

これを用いて B の行列要素を

$$< a''|B|a' > = \delta_{\alpha\alpha'} < a'|B|a' > \tag{1.4.29}$$

と書くことができる．したがって A も B も同じ基底ケットの集合を用いて対角行列で表わせる．（1.3.17）と（1.4.29）を用いて B を

$$B = \sum_{a''} |a'' >< a''|B|a'' >< a''| \tag{1.4.30}$$

と書ける．この演算子を A の固有ケットに作用させると

$$\begin{aligned} B|a' > &= \sum_{a''} |a'' >< a''|B|a'' >< a''|a' > \\ &= (< a'|B|a' >)|a' > \end{aligned} \tag{1.4.31}$$

となる．これは固有値

$$b' \equiv < a'|B|a' > \tag{1.4.32}$$

を持つ演算子 B の固有値方程式に他ならない．したがってケット $|a' >$ は A と B の**同時固有ケット**である．この同時固有ケットの特性を表わすのに，二

つの演算子を公平に扱って $|a',b'>$ を用いるとよい.

両立できる観測量は同時固有ケットを持つことが分かった. その証明をしたのは A の固有ケットに縮退がない場合であったが, n-重縮退があっても定理は成り立つ. すなわち

$$A|a'^{(i)}> = a'|a'^{(i)}> \quad , \qquad i = 1,\ 2,\ \cdots,\ n \tag{1.4.33}$$

となる場合で, ここで $|a'^{(i)}>$ は, すべて同じ固有値 a' を持つ n 個の互いに規格直交化された A の固有ケットとする. この場合には, 1.5節で議論することになる対角化の方法により, 演算子 B を対角化する $|a'^{(i)}>$ の適当な線形結合を作ってやればよい.

$|a',b'>$ で表示される A と B の同時固有ケットは

$$A|a',b'> = a'|a',b'>, \tag{1.4.34a}$$

$$B|a',b'> = b'|a',b'> \tag{1.4.34b}$$

という性質を持つ. 縮退のないとき, この記号は幾分過剰である. もし a' を指定すると $|a',b'>$ に現れる b' は (1.4.32) より必然的に知られることが明らかであるからである. $|a',b'>$ という記号は縮退のあるときに, はるかに力を発揮する. この点を説明するために簡単な例を用いよう.

軌道角運動量の本格的議論は本書の第3章で行なうが, 読者は既に初歩的な波動力学を勉強していて, $\mathbf{L}^2$ (軌道角運動量の二乗) および L_z (軌道角運動量の z-成分) の固有値が, それぞれ $\hbar^2 l\ (l+1)$ および $m_l\hbar$ であることを御存知であろう. ここで l は整数で, $m_l = -l,\ -l+1,\ \cdots,\ +l$ である. 軌道角運動量の状態を完全に特徴づけるには, l と m_l の両方を指定する必要がある. 例えば単に $l=1$ といったとき, m_l の値は0でも $+1$ でもまた -1 でもありうるし, 単に $m_l = 1$ といったとき, l は1,2,3,4 などの値をとりうる. l と m_l の両方を指定して初めて, 問題にしている角運動量の状態を唯一つ, 特徴づけるのに成功する. しばしば (a',b') の代りに**ひとまとめにした指標** K' が用いられる. すなわち

$$|K'> = |a', b'> \tag{1.4.35}$$

である．

明らかにこの考察を，幾つか（三つ以上）の互いに両立できる観測量のある場合，すなわち

$$[A, B] = [B, C] = [A, C] = \cdots = 0 \tag{1.4.36}$$

のときにも一般化できる．いま交換する観測量の**最大**の集合が分かったとしよう．つまり，それ以上はどんな観測量をも（1.4.36）と反せずには付け加えられないものとする．それぞれの演算子 A, B, C …の固有値は縮退していてよいが，一つの組み合わせ（a', b', c', …）を指定したとすると，対応する A, B, C …の同時固有ケットは唯一つ指定される．（a', b', c', …）を表わすのに，ひとまとめにした指標 K' を再び用いよう．規格直交関係は

$$|K'> = |a', b', c', \cdots> \tag{1.4.37}$$

に対して

$$< K''|K'> = \delta_{K'K''} = \delta_{aa'}\delta_{bb'}\delta_{cc'}\cdots \tag{1.4.38}$$

となる．一方，完備関係式，すなわち閉包（クロージャー）は

$$\sum_{K'}|K'><K'| = \sum_{a'}\sum_{b'}\sum_{c'}\cdots|a', b', c', \cdots><a', b', c', \cdots| = 1 \tag{1.4.39}$$

と書くことができる．

A と B が両立できる観測量であるとき，両者の測定を考えよう．A を初めに測り，a' という結果を得たとする．続いて B を測り b' という結果を得た．最後にもう一度 A を測定する．測定に関する我々の形式的議論によれば，3度目の測定ではいつも確実に a' が得られる．すなわち2番目の（B の）測定は，最初の（A の）測定で得られていた情報を壊さない．このことは A の固有値が縮退していないなら明らかである：

$$|\alpha> \xrightarrow[A\text{の測定}]{} |a', b'> \xrightarrow[B\text{の測定}]{} |a', b'> \xrightarrow[A\text{の測定}]{} |a', b'>. \tag{1.4.40}$$

縮退があるときの議論は次のようになる．第1の（Aの）測定でa'が得られた後，系はある線形結合

$$\sum_{i}^{n} c_{\alpha}^{(i)}|a',b^{(i)}> \tag{1.4.41}$$

に変わる．ここでnは縮退度であり，ケット$|a',b^{(i)}>$は演算子Aに関する限り，すべて同じ固有値a'を持つ．第2の（Bの）測定は，線形結合（1.4.41）の中のただ一項，例えば$|a',b^{(j)}>$を選び出す．しかしそれに対して第3の（Aの）測定を行えば，やはりa'を得る．縮退の有無を問わず，Aの測定とBの測定とは干渉しないのである．両立できるという術語は，まことに適当と思える．

両立できない観測量

ここでそれ程自明でない，両立できない観測量の検討にかかろう．強調すべき第一点は，両立できない観測量には同時固有ケットで作られる完全系がないことである．これを示すために逆が正しいとしてみよう．すると，（1.4.34a）と（1.4.34b）の性質を持つ同時固有ケットが存在することになる．明らかに

$$AB|a',\mathrm{b}'> = Ab'|a',b'> = a'b'|a',b'>, \tag{1.4.42}$$

$$BA|a',b'> = Ba'|a',b'> = a'b'|a',b'> \tag{1.4.43}$$

が成り立つので

$$AB|a',b'> = BA|a',b'> \tag{1.4.44}$$

となり，仮定に反して$[A, B]=0$となる．したがって一般に両立できない観測量に対し$|a',b'>$は意味を持たない．しかし，興味ある例外がある．AとBが両立できないとしても，（1.4.44）がすべての元にわたって成り立つような部分空間がケット空間内に存在することがある．軌道角運動量の理論からの一例がここで理解の助けになろう．$l=0$の状態（s-状態）を考えるとL_xと

L_y は交換しないにも拘らず，この状態は L_x と L_y の同時固有状態である（両演算子とも固有値ゼロになる）．この場合の部分空間は1次元である．

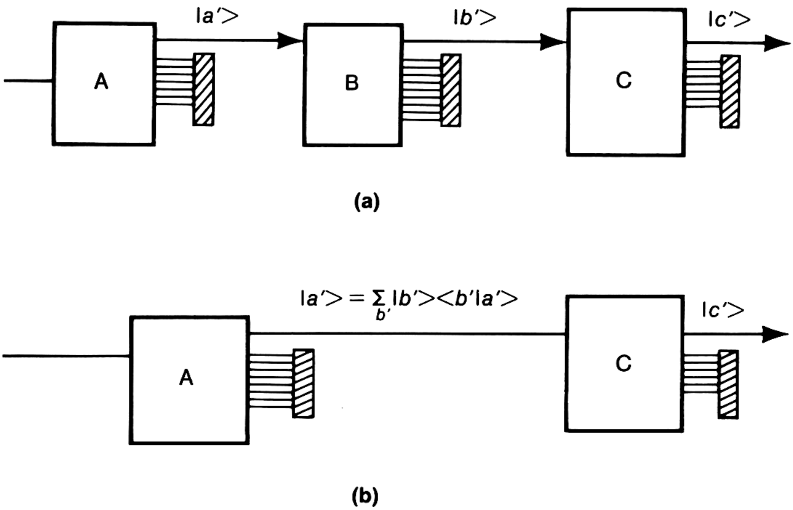


図 1.7.　一続きの選択的測定

1.1節で一続きのシュテルン・ゲルラッハの実験を議論したとき既に，両立できない観測量に伴うある特性に出会っている．ここで同種の実験をより一般的に検討しよう．図1.7(a)に示した一続きの選択的測定を考える．最初の（A）フィルターはある特定の $|a'\rangle$ を選び他のすべてを排除し，二番目の（B）フィルターは特定の $|b'\rangle$ を選び他を排除し，三番目の（C）フィルターは特定の $|c'\rangle$ を選び他を排除する．第一のフィルターを通った原子線が1に規格化されているとして，$|c'\rangle$ が得られる確率に注目する．確率はかけ合わすことができるので，明らかに

$$|\langle c'|b'\rangle|^2|\langle b'|a'\rangle|^2 \tag{1.4.45}$$

となる．そこで b' で和を取り，すべての可能な b' の経路を通る全確率を考え

る．どういう操作をするかというと，まず一番目の b' の経路のみを通って c' に達する確率を記録し，次に第二の b' のみを許して同様の手順を繰りかえしていく．すると最後に確率を加え合せて

$$\sum_{b'}|<c'|b'>|^2|<b'|a'>|^2=\sum_{b'}<c'|b'><b'|a'><a'|b'>\times<b'|c'> \tag{1.4.46}$$

が得られる．

そこでこれを図1.7(b)で示した別の配置，フィルターBはない（あるいは作用していない)場合と比較する．明らかに確率は単に $|<c'|a'>|^2$ であるが，これはまた

$$|<c'|a'>|^2=|\sum_{b'}<c'|b'><b'|a'>|^2=\sum_{b'}\sum_{b''}<c'|b'>\times<b'|a'><a'|b''><b''|c'> \tag{1.4.47}$$

のようにも書ける．表式（1.4.46）と（1.4.47）は違うことに注意せよ！ これは注目すべきことである．というのはどちらの場合も第一のフィルター（A）から出て来た純粋な状態 $|a'>$ の原子線は

$$|a'>=\sum_{b'}|b'><b'|a'> \tag{1.4.48}$$

のように B の固有ケットからできているとみなされるからである．和はすべての可能な b' の値に対してとる．注意すべき重要な点はCフィルターから出てくる結果が，B の測定が実際になされたかどうかに依存することである．第一の場合には，B の固有値のどれが実現したかを実験的に確かめている．第二の場合では，$|a'>$ が（1.4.48）の意味でいろいろな $|b'>$ から作り上げられていることを単に頭の中で考えているだけである．いいかえれば後で b' に関して和を取るにしても，様々の b' の経路を通る確率を実際に記録することが，決定的な違いを生むのである．ここに量子力学の核心がある．

この二つの表式が等しくなる条件は何だろうか．縮退のないときには

十分条件は

$$[A, B] = 0 \qquad \text{または} \quad [B, C] = 0 \tag{1.4.49}$$

である．これを示すのは読者の演習に残しておく．すなわち，今説明した特性は両立できない観測量の特徴である．

不確定関係

この節で議論する最後の課題は，不確定関係である．与えられた観測量 A に対して，

$$\Delta A \equiv A - \langle A \rangle \tag{1.4.50}$$

という**演算子**を定義する．この期待値は，いま考えているある物理状態に関してとることにする．$(\Delta A)^2$の期待値は A の**分散**（dispersion）として知られている．ここで

$$\begin{aligned} \langle (\Delta A)^2 \rangle &= \langle (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2) \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \end{aligned} \tag{1.4.51}$$

であるから，(1.4.51) の最右辺を分散のもう一つの定義と考えてもよい．同じ量に対して，**バリアンス**（variance）あるいは**平均二乗偏差**という術語が用いられることもある．期待値をとる状態が A の固有状態なら，明らかに分散はゼロとなる．粗っぽくいえば，観測量の分散は“ぼやけ”を表わす．例えばスピン1/2の系の S_z+ 状態では，S_x の分散は

$$\langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \tag{1.4.52}$$

と計算できる．これと対照的に $\langle (\Delta S_z)^2 \rangle$ の分散は S_z+ 状態で，明らかにゼロである．すなわち S_z+ 状態で，S_z は“鋭く”—— S_z の分散はゼロ—— 一方 S_x はぼやけている．

ここで**不確定関係**を述べる．これは，1.6節で検討することになる x–p 間のよく知られた不確定関係の一般化である．A と B を観測量としよう．このときどんな状態に対しても，不等式

$$<(\Delta A)^2><(\Delta B)^2> \geq \frac{1}{4}|<[A, B]>|^2 \qquad (1.4.53)$$

が必ず成り立つ．証明に先立って，補助定理を三つ述べる．

補助定理1． シュヴァルツの不等式

$$<\alpha|\alpha><\beta|\beta> \geq |<\alpha|\beta>|^2 \qquad (1.4.54)$$

が成り立つ．実ユークリッド空間で，それに類似しているのは

$$|\boldsymbol{a}|^2|\boldsymbol{b}|^2 \geq |\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}|^2 \qquad (1.4.55)$$

である．

証明　まず任意の複素数 λ に対して

$$(<\alpha| + \lambda^* <\beta|)\cdot(|\alpha> + \lambda|\beta>) \geq 0 \qquad (1.4.56)$$

が成り立つことに注目しよう．この不等式は λ を $-<\beta|\alpha>/<\beta|\beta>$ と置いても成り立つ：

$$<\alpha|\alpha><\beta|\beta> - |<\alpha|\beta>|^2 \geq 0. \qquad (1.4.57)$$

これは (1.4.54) と同じである．□

補助定理2． エルミート演算子の期待値は，実数である．

証明　証明は簡単である．(1.3.21) を使えばよい．□

補助定理 3． $C=-C^{\dagger}$ で定義されるエルミート交代の演算子の期待値は，純虚数である．

証明　この証明も自明である．□

これらの補助定理を使えば，不確定関係（1.4.53）をすぐに証明できる．補助定理 1 を

$$|\alpha>=\Delta A|>,\quad |\beta>=\Delta B|> \tag{1.4.58}$$

と置いて用いよう．空のケット $|>$ はここで任意のケットを考えてよいことを強調するものである．すると，ΔA と ΔB のエルミート性を用いて

$$<(\Delta A)^2><(\Delta B)^2>\geq|<\Delta A\Delta B>|^2 \tag{1.4.59}$$

が得られる．（1.4.59）の右辺を評価するために

$$\Delta A\Delta B=\frac{1}{2}[\Delta A,\Delta B]+\frac{1}{2}\{\Delta A,\Delta B\} \tag{1.4.60}$$

であることを注意しよう．ここで交換子 $[\Delta A,\Delta B]$ は $[A,B]$ に等しく，明らかにエルミート交代的

$$([A,B])^{\dagger}=(AB-BA)^{\dagger}=BA-AB=-[A,B] \tag{1.4.61}$$

である．これに対し，反交換子 $\{\Delta A,\Delta B\}$ は明らかにエルミート的だから，補助定理 2 と 3 を使って

$$<\Delta A\Delta B>=\frac{1}{2}\underbrace{<[A,B]>}_{\text{純虚数}}+\frac{1}{2}\underbrace{<\{\Delta A,\Delta B\}>}_{\text{実数}} \tag{1.4.62}$$

となる．すると（1.4.59）の右辺は

$$|<\Delta A\Delta B>|^2=\frac{1}{4}|<[A,B]>|^2+\frac{1}{4}|<\{\Delta A,\Delta B\}>|^2 \tag{1.4.63}$$

と変形できる．上式（1.4.63）の第 2 項（反交換子の項）を落せば，証明すべ

き不等式は成立の度合を強めるだけだから，これで（1.4.53）の証明は完成した*.

スピン1/2の系に不確定関係を応用することは，演習問題に残しておく．1.6節で，基本的な x-p 間の交換関係を議論するとき，またこの論題に戻ろう．

1.5 基底の変更

変換演算子

両立できない二つの観測量 A と B があるとしよう．ここで扱うケット空間は，$\{|a'\rangle\}$ の組によって張られているとも $\{|b'\rangle\}$ の組によって張られているとも見なせる．例えばスピン1/2の系では基底ケットとして $|S_z \pm\rangle$ を用いてもよいし代りに $|S_x \pm\rangle$ を用いてもよい．この二つの異なる基底ケットの組は、もちろん同じケット空間を張る．ここで二つの記述がいかに関連しているか調べてみよう．基底ケットの組換えを**基底の変更**あるいは**表示の変更**という．基本となる固有ケットとして $\{|a'\rangle\}$ が使われる基底は A 表示と呼ばれる．この基底では A に対応する正方行列が対角行列なので，A 対角表示と呼ばれることもある。

基本的課題は，元の規格直交集合 $\{|a'\rangle\}$ と新しい規格直交集合 $\{|b'\rangle\}$ を結ぶ変換演算子を構成することである．そのためにまず次の事を示そう．

定理 規格直交性と完備性を満たす二組の基底ケットの集合が与えられている．このとき

---

* 他の本でほとんどの著者は我々の記号で $\sqrt{\langle(\Delta A)^2\rangle}$ にあたるものを ΔA と書いて使っている．すると不確定関係は $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[A\,,\,B]\rangle|$ と書ける．一方，本書では ΔA と ΔB を数ではなく演算子［(1.4.50) を見よ］と考えることにしている．

$$|b^{(1)}> = U|a^{(1)}>, \ |b^{(2)}> = U|a^{(2)}>, \ \cdots\cdots, \ |b^{(N)}> = U|a^{(N)}> \tag{1.5.1}$$

とするユニタリー演算子 U が存在する．**ユニタリー演算子**とは，条件

$$U^{\dagger} U = 1 \tag{1.5.2}$$

および

$$UU^{\dagger} = 1 \tag{1.5.3}$$

を満たす演算子である．

証明　この定理を，実際に U を作って証明する．演算子

$$U = \sum_k |b^{(k)}><a^{(k)}| \tag{1.5.4}$$

がその役割を果たすものとし，U を $|a^{(l)}>$ にかけてみる．明らかに

$$U|a^{(l)}> = |b^{(l)}> \tag{1.5.5}$$

となることが $\{|a'>\}$ の規格直交性から保証される．さらに U はユニタリーである：

$$U^{\dagger} U = \sum_k \sum_l |a^{(l)}><b^{(l)}|b^{(k)}><a^{(k)}| = \sum_k |a^{(k)}><a^{(k)}| = 1\,. \tag{1.5.6}$$

ここで使ったのは $\{|b'>\}$ の規格直交性と $\{|a'>\}$ の完備性である．同様にして式 (1.5.3) が得られる． □

変換行列

演算子 U の行列表現を，元の基底 $\{|a'>\}$ で調べておくとよい．

（1.5.5）より明らかに

$$< a^{(k)}|U|a^{(l)} > = < a^{(k)}|b^{(l)} > \tag{1.5.7}$$

が得られる．つまり演算子 U の行列要素は，元の基底のブラと新しい基底のケットとの内積で作られている．３次元空間で単位基底ベクトル（$\hat{\boldsymbol{x}},\hat{\boldsymbol{y}},\hat{\boldsymbol{z}}$）の組を，他の組（$\hat{\boldsymbol{x}}',\hat{\boldsymbol{y}}',\hat{\boldsymbol{z}}'$）に変える回転行列が

$$R = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{x}}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}' & \hat{\boldsymbol{x}}\cdot\hat{\boldsymbol{y}}' & \hat{\boldsymbol{x}}\cdot\hat{\boldsymbol{z}}' \\ \hat{\boldsymbol{y}}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}' & \hat{\boldsymbol{y}}\cdot\hat{\boldsymbol{y}}' & \hat{\boldsymbol{y}}\cdot\hat{\boldsymbol{z}}' \\ \hat{\boldsymbol{z}}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}' & \hat{\boldsymbol{z}}\cdot\hat{\boldsymbol{y}}' & \hat{\boldsymbol{z}}\cdot\hat{\boldsymbol{z}}' \end{pmatrix} \tag{1.5.8}$$

と書かれるのを思い出そう（例えば Goldstein 1980, pp.128 ～ 37）．$<a^{(k)}|U|a^{(l)}>$ によって作られる正方行列は基底 $\{|a'>\}$ から基底 $\{|b'>\}$ への**変換行列**と呼ばれる．

元の基底での展開係数 $< a'|\alpha >$ が分かっている任意のケット $|\alpha>$

$$|\alpha > = \sum_{a'}|a' >< a'|\alpha > \tag{1.5.9}$$

が与えられたとき，$|\alpha>$ の新しい基底での展開係数 $< b'|\alpha >$ をどのように求めたらよいだろうか．答えは全く簡単である．式（1.5.9）に $< b^{(k)}|$ を掛けると（ここで混乱を防ぐため a' の代りに $a^{(l)}$ を使う）

$$\begin{aligned} < b^{(k)}|\alpha > &= \sum_l < b^{(k)}|a^{(l)} >< a^{(l)}|\alpha > \\ &= \sum_l < a^{(k)}|U^\dagger|a^{(l)} >< a^{(l)}|\alpha > \end{aligned} \tag{1.5.10}$$

が得られる．（1.5.10）を行列の言葉で表現すると，“新しい基底での $|\alpha>$ の列ベクトルは，元の基底での列ベクトルに正方行列 $U^\dagger$ を掛けて得られる”ことになる．すなわち

$$(\text{新しい表示}) = (U^\dagger)(\text{元の表示}) \tag{1.5.11}$$

である．新旧の行列要素を結ぶ関係式もまた，簡単に求まる：

$$
\begin{aligned}
< b^{(k)}|X|b^{(l)} > &= \sum_m\sum_n < b^{(k)}|a^{(m)} >< a^{(m)}|X|a^{(n)} >< a^{(n)}|b^{(l)} > \\
&= \sum_m\sum_n < a^{(k)}|U^{\dagger}|a^{(m)} >< a^{(m)}|X|a^{(n)} >< a^{(n)}|U|a^{(l)} >.
\end{aligned} \tag{1.5.12}
$$

この式は行列代数でよく知られた**相似変換**

$$X' = U^{\dagger}XU \tag{1.5.13}$$

である．

演算子 X の**トレース**は，対角成分の和として

$$\mathrm{tr}(X) = \sum_{a'} < a'|X|a' > \tag{1.5.14}$$

で定義される．この定義では特別な基底ケットの組を使っているが，tr（X）は表示によらないことが，次の式

$$
\begin{aligned}
\sum_{a'} < a'|X|a' > &= \sum_{a'b'b''} < a'|b' > < b'|X|b'' > < b''|a' > \\
&= \sum_{b'b''} < b''|b' > < b'|X|b'' > \\
&= \sum_{b'} < b'|X|b' >
\end{aligned} \tag{1.5.15}
$$

から分かる．また

$$\mathrm{tr}(XY) = \mathrm{tr}(YX), \tag{1.5.16a}$$

$$\mathrm{tr}(U^{\dagger}XU) = \mathrm{tr}(X), \tag{1.5.16b}$$

$$\mathrm{tr}(|a'><a''|) = \delta_{a'a''}, \tag{1.5.16c}$$

$$\mathrm{tr}(|b'><a'|) = <a'|b'> \tag{1.5.16d}$$

も証明できる．

対 角 化

演算子 B の行列要素が元の基底 $\{|a'>\}$ で分かっているとしたときに，B の固有値と固有ベクトルをどのようにして見つけたらよいであろうか．今迄議論してこなかったこの問題は，B を対角化するユニタリー行列を見出すことと同値である．読者は既に行列の代数で対角化の方法には慣れていると思うが，この問題をディラックのブラ・ケットの記号で解いてみるのもそれなりの価値がある．

我々の関心は

$$B|b'> = b'|b'> \tag{1.5.17}$$

という性質を持つ固有値 b' と固有ケット $|b'>$ を得ることである．まず，この式を

$$\sum_{a'} < a''|B|a'> < a'|b'> = b' < a''|b'> \tag{1.5.18}$$

と書き直しておく．(1.5.17)の $|b'>$ が B の l 番目の固有ケットを表すとき，(1.5.18)は行列の記号で

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & \cdots \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^{(l)} \\ C_2^{(l)} \\ \vdots \end{pmatrix} = b^{(l)} \begin{pmatrix} C_1^{(l)} \\ C_2^{(l)} \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{1.5.19}$$

と表せる．ただし

$$B_{ij} = < a^{(i)}|B|a^{(j)} >, \tag{1.5.20a}$$

$$C_k^{(l)} = < a^{(k)}|b^{(l)}> \tag{1.5.20b}$$

で，i，j，k はケットの空間の次元である N までの整数値をとる．線形代数で知られている通り，$C_1^{(l)} = C_2^{(l)} = \cdots = C_N^{(l)} = 0$ 以外の解は特性方程式

$$\det(B-\lambda I)=0 \tag{1.5.21}$$

が満たされるときのみ存在する．これは λ に対する N 次の代数方程式であり，この方程式の N 個の根が求めている固有値 $b^{(l)}$ である．$b^{(l)}$ が分かれば対応する $C_k^{(l)}$ は，規格化条件から決めるべき全体にかかる定数を除いて求められる．(1.5.20b) と (1.5.7) を比較すると，$C_k^{(l)}$ がまさに，$\{|a'>\}$ から $\{|b'>\}$ へ基底を変更するときに必要なユニタリー行列の要素になっていることが分かる．

この手続きでは，B のエルミート性が重要である．例えば (1.3.38) ないし (1.4.19) で定義された S_+ を考えよう．この演算子は明らかにエルミート的でない．対応する行列を S_z の基底で書くと

$$S_+ \doteq \hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix} \tag{1.5.22}$$

となるが，どのようなユニタリー行列もこれを対角化できない．第2章で調和振動子のコヒーレント状態と関連して，非エルミート的な演算子の固有ケットに出会うであろう．しかし，そのような固有ケットは完全規格直交系を作らないことが知られており，この節で展開した数学形式をそのまま適用するわけにはいかない．

ユニタリー的に同値な観測量

この節の最後に，観測量のユニタリー変換についての重要な定理を検討しよう．

定理　U 演算子 (1.5.4) で関係づけられる二つの規格直交系 $\{|a'>\}$，$\{|b'>\}$ を，再び考えよう．U が分かれば A の**ユニタリー変換** UAU^{-1} を作ることができるが，このとき A と UAU^{-1} を**ユニタリー的に同値な観測量**という．A の固有値方程式

$$A\,|a^{(l)}>=a^{(l)}|a^{(l)}> \tag{1.5.23}$$

は明らかに

$$UAU^{-1}U|a^{(l)}> = a^{(l)}U|a^{(l)}> \tag{1.5.24}$$

を意味している．そして，これは，書き直すと

$$(UAU^{-1})|b^{(l)}> = a^{(l)}|b^{(l)}> \tag{1.5.25}$$

となる．

一見簡単なこの結果には，非常に深い意味がある．それは $|b'>$ が UAU^{-1} の固有ケットであり，A と全く同じ固有値を持つことを述べている．いいかえれば，ユニタリー的に同値な観測量のスペクトルは一致する．

固有ケット $|b^{(l)}>$ は，定義より関係式

$$B|b^{(l)}> = b^{(l)}|b^{(l)}> \tag{1.5.26}$$

を満たす．(1.5.25) と (1.5.26) を比較すると，B と UAU^{-1} が同時に対角化できるという結論が引き出せる．ここで，UAU^{-1} は B そのものと同じであろうかという疑問が自然に起こる．物理の問題ではたいていの場合，答えはイエスである．たとえば S_x と S_z を例にとろう．第3章で議論するようにこの二つは，実際 y 軸のまわりの角度が$\pi/2$の回転演算子であるユニタリー演算子によって関連づけられている．この場合，S_x 自身が S_z のユニタリー変換で得られる．S_x と S_z の示す固有値の組は同じもの，すなわち $\hbar/2$と $-\hbar/2$であるから，我々の定理はこの特別な場合に成り立っていることが分かる．

1.6　位置，運動量および平行移動

連続スペクトル

今迄考えて来た観測量は，すべて離散的固有値スペクトルを示すものと仮定してきた．ところが量子力学では連続的固有値をとる観測量がある．運動量の z- 成分 p_z を例にとろう．量子力学ではこれも，エルミート演算子で表される．しかし，S_z と対照的に，P_z の固有値は（適当な単位で）$-\infty$ から $+\infty$ までのあらゆる実数値をとりうる．

連続スペクトルを示す固有ケットで張られるベクトル空間の，厳密な数学はなかなか手ごわい．この空間の次元はもちろん無限大である．幸いにして，離散的固有値をもつ有限次元のベクトル空間に対して得た結果の多くは，直ちに一般化できる．そのまま一般化できないところには，注意書きをつけることにしよう．

固有値方程式（1.2.5）からの類推からはじめる．連続スペクトルの場合に，それは

$$\xi|\xi'>=\xi'|\xi'> \tag{1.6.1}$$

と書ける．ξは演算子，ξ' は単なる数である．つまりケット $|\xi'>$ は演算子 ξ の固有ケットであり，ちょうど $|a'>$ が演算子 A の固有値 a' のケットであることと同じである．

この類推を押し進める際，クロネッカー記号はディラックのデルタ関数で置き換える．また固有値 $\{a'\}$ に関する離散的な和は，連続変数 ξ' に関する積分で置き換える．すると，

$$<a'|a''>=\delta_{a'a''}\longrightarrow<\xi'|\xi''>=\delta(\xi'-\xi''), \tag{1.6.2a}$$

$$\sum_{a'}|a'><a'|=1\longrightarrow\int d\xi'|\xi'><\xi'|=1, \tag{1.6.2b}$$

$$|\alpha>=\sum_{a'}|a'><a'|\alpha>\longrightarrow|\alpha>=\int d\xi'|\xi'><\xi'|\alpha>, \tag{1.6.2c}$$

$$\sum_{a'}|<a'|\alpha>|^2=1\longrightarrow\int d\xi'|<\xi'|\alpha>|^2=1, \tag{1.6.2d}$$

$$<\beta|\alpha> = \sum_{a'} <\beta|a'><a'|\alpha>$$

$$\longrightarrow <\beta|\alpha> = \int d\xi' <\beta|\xi'><\xi'|\alpha>, \qquad (1.6.2e)$$

$$<a''|A|a'> = a'\delta_{a''a'} \longrightarrow <\xi''|\xi|\xi'> = \xi'\delta(\xi''-\xi') \qquad (1.6.2f)$$

となる．(1.6.2c) と (1.6.2e) を得るのに，(1.6.2b) の完備性が使われていることを，特に注意しよう．

位置の固有ケットと位置の測定

1.4節で強調したことだが，量子力学での測定は，本質的に沪過過程である．この考えをスペクトルが連続的な観測量に拡張するには，一つの例を扱うのが一番であろう．このために1次元での位置（すなわち座標）の演算子を考える．

位置演算子 x の固有ケット $|x'>$ は

$$x|x'> = x'|x'> \qquad (1.6.3)$$

を満足し完全系を作ると仮定する．ここで x' は長さの次元を持つ単なる数で，例えば0.23cm でもよく，一方 x は演算子である．任意の物理的状態の状態ケットは $\{|x'>\}$ によって

$$|\alpha> = \int_{-\infty}^{\infty} dx'|x'><x'|\alpha> \qquad (1.6.4)$$

と展開できる．

ここで観測量としての位置の，極めて理想化された選択的測定を考えよう．非常に小さな検出器を置いて，粒子が x' にきたときのみカチッと鳴るようにしておく．検出器がカチッと鳴った直後，該当する状態は $|x'>$ で表わされているといえる．いいかえれば，検出器が鳴ったとき，$|\alpha>$ は突然 $|x'>$ に“跳び移る”のである．これはちょうど S_z 型の SG 装置を通ったときスピンの任意の状態が S_z+（または S_z-）の状態に跳び移るのと同様であ

る．

実際に検出器ができる最良のことは，粒子の位置を x' の周りのある狭い範囲に限定することである．現実の検出器は，粒子がある狭い領域（$x' - \frac{\Delta}{2}$, $x' + \frac{\Delta}{2}$）にいることが観測されたとき，カチッと鳴る．このような検出器で1カウントが記録されたとき，状態ケットは，突然

$$|\alpha> = \int_{-\infty}^{\infty} dx'' |x''><x''|\alpha> \xrightarrow{\text{測定}} \int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} dx'' |x''><x''|\alpha> \tag{1.6.5}$$

と変化するのである．狭い間隔の中で $<x''|\alpha>$ が目立った変化をしないと仮定すると，検出器の鳴る確率は

$$|<x'|\alpha>|^2 \, dx' \tag{1.6.6}$$

で与えられる．ここでは Δ の代りに dx' と書いた．これは A が測定されたときに $|\alpha>$ が $|a'>$ へ跳び移る確率，$|<a'|\alpha>|^2$ と類似している．粒子が $-\infty$ から $+\infty$ までのどこかで記録される確率は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' |<x'|\alpha>|^2 \tag{1.6.7}$$

で与えられ，$|\alpha>$ が規格化されていると

$$<\alpha|\alpha> = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx' <\alpha|x'><x'|\alpha> = 1 \tag{1.6.8}$$

によって（1.6.7）も1に規格化される．

波動力学になじみのある読者は，ここまでくれば，$<x'|\alpha>$ が $|\alpha>$ で表される物理的状態の**波動関数**になっていることに気づいたことであろう．このように x- 表示での展開係数が波動関数と一致することについては，1.7節でさらに議論する．

位置の固有ケットの概念は3次元に拡張できる．非相対論的量子力学

では位置の固有ケット $|\boldsymbol{x}'>$ は完全系を作ると仮定する．すると，1粒子の状態ケットはスピンのような内部自由度を無視すれば，$\{|\boldsymbol{x}'>\}$ を用いて

$$|\alpha> = \int d^3x' |\boldsymbol{x}'><\boldsymbol{x}'|\alpha> \tag{1.6.9}$$

と展開できる．ここで $\boldsymbol{x}'$ は x',y',z' を表す．すなわち $|\boldsymbol{x}'>$ は1.4節の意味で観測量 x,y および z の同時固有ケットである：

$$|\boldsymbol{x}'> \equiv |x', y', z'>, \tag{1.6.10a}$$

$$x|\boldsymbol{x}'> = x'|\boldsymbol{x}'>,\quad y|\boldsymbol{x}'> = y'|\boldsymbol{x}'>,\quad z|\boldsymbol{x}'> = z'|\boldsymbol{x}'>. \tag{1.6.10b}$$

そもそもこうした同時固有ケットを考えることができるためには，位置ベクトルの3成分が，同時に任意の精度で測定できることを，暗に仮定している．したがって

$$[x_i, x_j] = 0 \tag{1.6.11}$$

が成り立たなければならない．ここで x_1, x_2, x_3 は，それぞれ x, y, z を表わす．

平行移動

ここで平行移動，ないし空間移動という，大変重要な概念を導入しよう[†]．はじめに，$\boldsymbol{x}'$ 近傍によく局在している状態があるとする．この状態を今度は $\boldsymbol{x}'+d\boldsymbol{x}'$ 近傍によく局在した状態へ，他の自由度（例えばスピン方向）は不変のまま変える操作を考える．このような操作を $d\boldsymbol{x}'$ だけの**無限小平行移動**と定義することにし，その働きをする演算子を $\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')$ と記す．すなわち

$$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')|\boldsymbol{x}'> = |\boldsymbol{x}' + d\boldsymbol{x}'> \tag{1.6.12}$$

† 訳注：並進ともいう．

であり，ここで任意に取れる位相因子は便宜上1にとった．この式の右辺も位置の固有ケットであるが，固有値は $\boldsymbol{x}'+d\boldsymbol{x}'$ であることに注意しよう．明らかに $|\boldsymbol{x}'>$ は，無限小平行移動の固有ケットでない．

任意の状態ケット $|\alpha>$ を位置の固有ケットで展開することによって，無限小平行移動が $|\alpha>$ に与える効果を検討することができる．すなわち

$$\begin{aligned}|\alpha>\to\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')|\alpha> &= \mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')\int d^3x'|\boldsymbol{x}'><\boldsymbol{x}'|\alpha> \\ &= \int d^3x'|\boldsymbol{x}'+d\boldsymbol{x}'><\boldsymbol{x}'|\alpha> \qquad (1.6.13)\end{aligned}$$

であるが，この右辺は積分が全空間におよび，$\boldsymbol{x}'$ は単に積分変数なので

$$\int d^3x'|\boldsymbol{x}'+d\boldsymbol{x}'><\boldsymbol{x}'|\alpha> = \int d^3x'|\boldsymbol{x}'><\boldsymbol{x}'-d\boldsymbol{x}'|\alpha> \qquad (1.6.14)$$

とも書き直せる．これは，平行移動した状態 $\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')|\alpha>$ の波動関数が，$<\boldsymbol{x}'|\alpha>$ の 中の $\boldsymbol{x}'$ を $\boldsymbol{x}'-d\boldsymbol{x}'$ で置きかえて得られることを示している．

他の教科書ではよく，平行移動を説明するために同等ではあるが別の方法がとられている．物理系そのものの無限小平行移動を考える代りに，用いられる座標系を，原点が逆方向に $-d\boldsymbol{x}'$ だけ移動するように平行移動させるのである．物理的にいえば，この別の方法で問題にするのは，$-d\boldsymbol{x}'$ だけ移動した座標系に乗った観測者にとって，同じ状態ケットがどのように見えるかである．この本ではこの方法は使わないようにするが，もちろん二つを混同しないことが重要である．

ここで無限小平行移動演算子 $\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')$ の持つべきいくつかの特性を列記しよう．要求する最初の特性は，確率の保存から必要となるユニタリー性である．$|\alpha>$ が1に規格化されているならば平行移動後のケット $\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')|\alpha>$ もまた，1に規格化されているとするのが合理的である．そこで

$$<\alpha|\alpha> = <\alpha|\mathscr{T}^\dagger(d\boldsymbol{x}')\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')|\alpha> \qquad (1.6.15)$$

となるが，この条件は，無限小平行移動がユニタリーであること，すなわち

$$\mathscr{T}^{\dagger}(d\boldsymbol{x}')\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')=1 \tag{1.6.16}$$

を要求すれば保証される．一般に，ユニタリー変換のもとでケットのノルムは保存される．第2の特性を求めるために，はじめに $d\boldsymbol{x}'$，続いて $d\boldsymbol{x}''$ ($d\boldsymbol{x}'$ と $d\boldsymbol{x}''$ は同方向である必要はない) という2段階の無限小平行移動を考えることにしよう．正味の結果はベクトル和 $d\boldsymbol{x}'+d\boldsymbol{x}''$ で表わされる1回の平行移動操作になることを期待して

$$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}'')\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')=\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}'+d\boldsymbol{x}'') \tag{1.6.17}$$

を要求する．第3の特性を求めるため，逆方向の平行移動を考えてみよう．逆方向の平行移動は，もとの平行移動の逆と同じであると期待する：

$$\mathscr{T}(-d\boldsymbol{x}')=\mathscr{T}^{-1}(d\boldsymbol{x}'). \tag{1.6.18}$$

第4の特性として，$d\boldsymbol{x}'\to 0$ のとき，平行移動操作は，恒等操作に帰ること，すなわち

$$\lim_{d\boldsymbol{x}'\to 0}\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')=1 \tag{1.6.19}$$

並びに，$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')$ と恒等演算子との差は，$d\boldsymbol{x}'$ の1次であることを要求する．

ここで無限小平行移動演算子を

$$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')=1-i\boldsymbol{K}\cdot d\boldsymbol{x}' \tag{1.6.20}$$

と書き，$\boldsymbol{K}$ の成分 K_x, K_y, K_z を**エルミート演算子**とすれば，上述の性質がすべて満足されることを示す．最初の特性，$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')$ のユニタリー性は，次のように確認できる：

$$\begin{aligned}\mathscr{T}^{\dagger}(d\boldsymbol{x}')\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')&=(1+i\boldsymbol{K}^{\dagger}\cdot d\boldsymbol{x}')(1-i\boldsymbol{K}\cdot d\boldsymbol{x}')\\&=1-i(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{K}^{\dagger})\cdot d\boldsymbol{x}'+\mathrm{O}[(d\boldsymbol{x}')^2]\end{aligned}$$

$$\simeq 1 . \tag{1.6.21}$$

ここで dx' の 2 次を，無限小平行移動に対して無視した．第 2 の特性 [（1.6.17）] もまた，次のように証明できる：

$$\begin{aligned}\mathscr{T}(dx'')\mathscr{T}(dx') &= (1 - i\boldsymbol{K}\cdot dx'')(1 - i\boldsymbol{K}\cdot dx') \\ &\simeq 1 - i\boldsymbol{K}\cdot(dx' + dx'') = \mathscr{T}(dx' + dx'').\end{aligned} \tag{1.6.22}$$

また第 3 および第 4 の特性を，（1.6.20）は明らかに満たしている．

（1.6.20）が $\mathscr{T}(dx')$ の正しい形であることを認めると，$\boldsymbol{K}$ 演算子と $\boldsymbol{x}$ 演算子の極めて基本的な関係式を導くことができる．初めに

$$\boldsymbol{x}\mathscr{T}(dx')|x'> = \boldsymbol{x}|x' + dx'> = (x' + dx')|x' + dx'> \tag{1.6.23a}$$

および

$$\mathscr{T}(dx')\boldsymbol{x}|x'> = x'\mathscr{T}(dx')|x'> = x'|x' + dx'> \tag{1.6.23b}$$

に注目しよう．したがって

$$[\boldsymbol{x}, \mathscr{T}(dx')]|x'> = dx'|x' + dx'> \simeq dx'|x'> \tag{1.6.24}$$

となる．（1.6.24）の最終項を導いた際の誤差は dx' の 2 次となる．ここで $|x'>$ は任意の位置固有ケットであってよい．ところで位置固有ケットは完全系を作ることが知られているので，**演算子に対する恒等式**

$$[\boldsymbol{x}, \mathscr{T}(dx')] = dx' \tag{1.6.25}$$

すなわち

$$-i\boldsymbol{x}\boldsymbol{K}\cdot dx' + i\boldsymbol{K}\cdot dx'\boldsymbol{x} = dx' \tag{1.6.26}$$

が成立しなければならない．ここで（1.6.25）および（1.6.26）の右辺にある

dx' は，数 dx' に $|x'>$ で張られるケット空間の恒等演算子がかかったものと理解される．dx' を $\hat{x}_j$ 方向に選び，$\hat{x}_i$ との内積を作ると

$$[x_i, K_j] = i\delta_{ij} \tag{1.6.27}$$

が得られる．ここでも，δ_{ij} には恒等演算子がかかっているものと理解する．

平行移動生成演算子としての運動量

等式（1.6.27）は位置演算子 x, y, z と K 演算子 K_x, K_y, K_z との基本的な交換関係である．ここまでのところ，K 演算子は（1.6.20）によって，無限小平行移動演算子を用いて定義されていることを思い出そう．一体この K にはどのような物理的意味が付けられるだろうか．

J．シュウィンガーは量子力学の講義で，こう指摘したことがある．"基本的特性を表現するのに，名前だけを古典物理学から借用しよう．"と．今の場合，古典力学から借用したいのは，運動量が無限小平行移動の**生成演算子**[†]であるという概念である．古典力学での無限小平行移動は，正準変換

$$\boldsymbol{x}_{新} \equiv \boldsymbol{X} = \boldsymbol{x} + d\boldsymbol{x}\,,\ \boldsymbol{p}_{新} \equiv \boldsymbol{P} = \boldsymbol{p} \tag{1.6.28}$$

と見なすことができ，母関数

$$F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{P}) = \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{P} + \boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{x} \tag{1.6.29}$$

から得られる．ここで $\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{P}$ は対応する運動量である．(Goldstein 1980, p.395 および p.411)．

この等式は量子力学の無限小平行移動演算子（1.6.20）と驚くほどよく似ている．特に（1.6.29）中の $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{P}$ が恒等変換（$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{x}, \boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}$）の母関数であることを思い起こすと，そう見えるであろう．そこで演算子 $\boldsymbol{K}$ が何らかの意味で，量子力学の運動量演算子と関係があると推測したくなる．

演算子 $\boldsymbol{K}$ を運動量演算子そのものとみなせるであろうか．残念ながら次元が違う．演算子 $\boldsymbol{K}$ の次元は $\boldsymbol{K}\cdot d\boldsymbol{x}'$ が無次元でなければならないから

† 訳注：生成子，母関数ともいう。

1/長さ である．しかし

$$K = \frac{\boldsymbol{p}}{\text{作用量の次元を持つ普遍定数}} \tag{1.6.30}$$

と置くのは正当であろう．この普遍定数の実際の数値を，量子力学の基本的要請から決めるわけにはいかない．定数がここで必要なのは，歴史的に見れば量子力学より先に古典力学が，巨視的な量——地球の円周とか，1 ccの水の質量とか，平均太陽日の時間とか——を記述するのに便利な単位を用いて発展してしまったためである．巨視的物理学以前に微視的物理学が定式化されていたならば，物理学者はきっと（1.6.30）に現われる普遍定数が1になるように基本単位を選んだに違いない．

静電気学との類似を考えると助けになる．距離 r だけ離れた電荷 e の2粒子間の相互作用エネルギーは，e^2/r に比例する．非有理ガウス単位では，比例定数は1であるが，電気技術者にもっと便利なMKS有理 単位では，$1/4\pi\varepsilon_0$ となる．

（1.6.30）式に現れる普遍定数は，実は1924年に書かれたL.ド・ブロイの関係式

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \tag{1.6.31}$$

に現われた定数 $\hbar$ と同じになる．ここで λ は“物質波”の波長である．いいかえれば，演算子 K は波数—すなわち波長の逆数に 2π をかけたもので通常 k と記される—に対応する量子力学的演算子である．こう同定すれば無限小平行移動演算子 $\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')$ は，$\boldsymbol{p}$ を運動量演算子として

$$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}') = 1 - i\boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{x}'/\hbar \tag{1.6.32}$$

のように表わせる．交換関係（1.6.27）はこのとき

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{1.6.33}$$

となる.

交換関係（1.6.33）は，例えば x と p_x（x と p_y ではなく）が両立できない演算子であることを意味している．したがって x と p_x の同時固有ケットを見つけることは不可能である．1.4節の一般公式をここで適用するとW. ハイゼンベルクの位置と運動量の不確定関係

$$<(\Delta x)^2><(\Delta p_x)^2> \geq \hbar^2/4 \tag{1.6.34}$$

が得られる．（1.6.34）の応用のいくつかを1.7節で扱う．

ここまでは無限小平行移動を扱ってきた．有限平行移動—すなわち，有限変位の空間移動—は無限小平行移動を繰返し合成することで得られる．x-方向の $\Delta x'$ だけの有限平行移動

$$\mathscr{T}(\Delta x'\hat{\mathbf{x}})|\mathbf{x}'> = |\mathbf{x}' + \Delta x'\hat{\mathbf{x}}> \tag{1.6.35}$$

を考えよう．それぞれが x-方向の $\Delta x'/N$ だけの空間移動である無限小平行移動を N 回合成して，$N \to \infty$ とすると

$$\mathscr{T}(\Delta x'\hat{\mathbf{x}}) = \lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{ip_x\Delta x'}{N\hbar}\right)^N = \exp\left(-\frac{ip_x\Delta x'}{\hbar}\right) \tag{1.6.36}$$

が得られる．ここで $\exp(-ip_x\Delta x'/\hbar)$ は演算子 p_x の関数である．一般に任意の演算子 X に対して，

$$\exp(X) \equiv 1 + X + \frac{X^2}{2!} + \cdots \tag{1.6.37}$$

と理解する．

平行移動の持つ基本的性質の一つは，異なる方向（例えば x-方向と y-方向）へ続けて行う平行移動は，互いに交換することである．このことは，図1.8より明らかに分かる．A から B に移るのに，C を通ろうが D を通ろうが問題でない．数学的に表わすと

$$\mathscr{T}(\Delta y'\hat{\boldsymbol{y}})\mathscr{T}(\Delta x'\hat{\boldsymbol{x}}) = \mathscr{T}(\Delta x'\hat{\boldsymbol{x}} + \Delta y'\hat{\boldsymbol{y}})$$
$$\mathscr{T}(\Delta x'\hat{\boldsymbol{x}})\mathscr{T}(\Delta y'\hat{\boldsymbol{y}}) = \mathscr{T}(\Delta x'\hat{\boldsymbol{x}} + \Delta y'\hat{\boldsymbol{y}}) \tag{1.6.38}$$

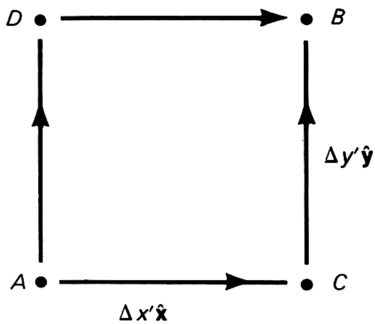


図 1.8. 異なる方向へ続けて行う平行移動

と書ける．このことは見た目ほど自明ではない．第3章で示すように，異なる軸のまわりの回転は交換しない．$\Delta x'$ と$\Delta y'$ とを2次まで取ると

$$[\mathscr{T}(\Delta y'\hat{\boldsymbol{y}}), \mathscr{T}(\Delta x'\hat{\boldsymbol{x}})] = \left[\left(1 - \frac{ip_y\Delta y'}{\hbar} - \frac{p_y{}^2(\Delta y')^2}{2\hbar^2} + \cdots\right),\right.$$
$$\left.\left(1 - \frac{ip_x\Delta x'}{\hbar} - \frac{p_x{}^2(\Delta x')^2}{2\hbar^2} + \cdots\right)\right]$$
$$\simeq -\frac{(\Delta x')(\Delta y')[p_y, p_x]}{\hbar^2} \tag{1.6.39}$$

が得られる．$\Delta x'$ と $\Delta y'$ とは任意なので，(1.6.38) の要請，すなわち

$$[\mathscr{T}(\Delta y'\hat{\boldsymbol{y}}), \mathscr{T}(\Delta x'\hat{\boldsymbol{x}})] = 0 \tag{1.6.40}$$

から直ちに

$$[p_x, p_y] = 0 \tag{1.6.41}$$

が導かれる．あるいはもっと一般に

$$[p_i, p_j] = 0 \tag{1.6.42}$$

が導かれる．この交換関係は，異なる方向への平行移動が交換するという事実に直結した結果である．変換の生成演算子が互いに交換する時はいつでも，対応する群は**アーベル型**であるという．3次元の平行移動群はアーベル型である．

等式（1.6.42）は，p_x，p_y，p_zが互いに両立できる観測量であることを意味している．そこでp_x，p_y，p_zの同時固有ケット

$$|\boldsymbol{p}'> \equiv |p_x', p_y', p_z'>, \tag{1.6.43a}$$

$$p_x|\boldsymbol{p}'> = p_x'|\boldsymbol{p}'>, \quad p_y|\boldsymbol{p}'> = p_y'|\boldsymbol{p}'>, \quad p_z|\boldsymbol{p}'> = p_z'|\boldsymbol{p}'> \tag{1.6.43b}$$

を考えることができる．このような運動量の固有ケットに，$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')$が与える効果を調べると興味あることが分かる．すなわち

$$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')|\boldsymbol{p}'> = \left(1 - \frac{i\boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{x}'}{\hbar}\right)|\boldsymbol{p}'> = \left(1 - \frac{i\boldsymbol{p}'\cdot d\boldsymbol{x}'}{\hbar}\right)|\boldsymbol{p}'> \tag{1.6.44}$$

なので，運動量の固有ケットはわずかな位相変化を受けるものの，元のままであることが分かる．したがって

$$[\boldsymbol{p}, \mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')] = 0 \tag{1.6.45}$$

からも予期できるように，$|\boldsymbol{x}'>$と違い$|\boldsymbol{p}'>$は$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')$の固有ケットなのである．しかしながら$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')$の固有値が複素数であることに注意して欲しい．$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')$はユニタリーであるもののエルミート的ではないので，ここで実数の固有値を期待することはできない．

正準交換関係

平行移動の性質を調べた結果から推測することのできた交換関係をま

とめよう．

$$[x_i, x_j]=0 \qquad [p_i, p_j]=0 \qquad [x_i, p_j]=i\hbar\,\delta_{ij} \tag{1.6.46}$$

これらの関係式は，量子力学の基礎となっている．P.A.M. ディラックは著書の中で，これらを“基本的な量子条件”と呼んだ．一般には**正準交換関係**または**基本的交換関係**と呼ばれている．

歴史を遡ると1925年に W. ハイゼンベルクは，当時知られていた原子遷移の線スペクトルの結合則が，それらの振動数にある積の法則に従う数の配列を関連させると，最もうまく理解できることを示した．そのすぐあとで，M. ボルンと P. ヨルダンが，ハイゼンベルクの積の法則は本質的に行列代数の法則であることを指摘し，(1.6.46) の行列表示を基礎に理論が発展した*．今では**行列力学**として知られるものである．

やはり1925年に，P.A.M. ディラックは量子力学の種々の関係式が対応する古典的関係式から，単に古典的ポアソン括弧式を交換子で置き換えて得られることに注目した．つまり

$$[\;\;,\;\;]_{\text{古典的}} \longrightarrow \frac{[\;\;,\;\;]}{i\hbar} \tag{1.6.47}$$

とするのである．ここで古典的ポアソン括弧式は，q と p との関数に対して

$$[A(q,p), B(q,p)]_{\text{古典的}} \equiv \sum_s \left(\frac{\partial A}{\partial q_s}\frac{\partial B}{\partial p_s} - \frac{\partial A}{\partial p_s}\frac{\partial B}{\partial q_s} \right) \tag{1.6.48}$$

によって定義されていたことを思い出そう．例えば，古典力学において，

$$[x_i, p_j]_{\text{古典的}} = \delta_{ij} \tag{1.6.49}$$

が成立し，これを量子力学に直すと (1.6.33) になる．

ディラックの規則 (1.6.47) は，古典的ポアソン括弧式と量子力学的

* ゲッチンゲンにある M. ボルンの墓石に，$pq-qp=h/2\pi i$ と彫られているのは，当を得たことである．

交換子が類似した代数的性質を満足することを考えるともっともに思われる．特に以下の関係式は[　,　]が古典的ポアソン括弧式の場合にも量子力学的交換子の場合にも証明できる：

$$[A, A] = 0, \tag{1.6.50a}$$

$$[A, B] = -[B, A], \tag{1.6.50b}$$

$$[A, c] = 0, \quad (c \text{ は単なる数}) \tag{1.6.50c}$$

$$[A+B, C] = [A, C] + [B, C], \tag{1.6.50d}$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C], \tag{1.6.50e}$$

$$[A,[B, C]] + [B,[C, A]] + [C,[A, B]] = 0. \tag{1.6.50f}$$

最後の関係式は**ヤコビの恒等式**として知られている*．しかし，ここには重要な差がある．第1に，古典的ポアソン括弧式の次元は（1.6.48）に現れている q や p での微分のために，量子力学的交換子の次元とは異なる．第2に，q と p の実関数のポアソン括弧式は実であるが，二つのエルミート演算子の交換子はエルミート交代的である．((1.4.61)式および1.4節の補助定理3を見よ)．この差を考慮して，因子 $i\hbar$ が（1.6.47）には入っている．

我々は正準交換関係を得るのに，ディラック流の類推を追求することを，わざと避けて来た．ここで交換関係を求めた方法の基礎になっているのは，専ら，(1) 平行移動の性質と，(2) 平行移動の生成演算子を，運動量を作用の次元を持つ普遍定数で割ったもの，と同一視したことの2点にある．この方法の方がより強力だと信ずる理由は，観測量が古典的類推を持たない場合にも一般化できるからである．例えば，1.4節で扱ったスピン角運動量成分は，古典力学の p や q と何の関係もない．それにも拘らず第3章で示すように，スピン角運動量の交換関係は回転の性質を用いて導くことができる．それはまさに正準交換関係を平行移動の性質を用いて導いたのと同じである．

---

* 量子力学でのヤコビの恒等式の証明が，古典論の場合よりずっと簡単なのは面白い．

1.7　位置空間および運動量空間における波動関数

位置空間の波動関数

この節では位置空間および運動量空間での波動関数の性質を，系統的に研究しよう．簡単のために，再び1次元の場合に戻ろう．用いる基底ケットは位置ケットで

$$x|x'> = x'|x'> \tag{1.7.1}$$

を満足し，直交条件が

$$<x''|x'> = \delta(x''-x') \tag{1.7.2}$$

と書けるように規格化されている．既に注意したように，物理状態をあらわすケットは $|x'>$ によって展開でき

$$|\alpha> = \int dx'|x'><x'|\alpha> \tag{1.7.3}$$

その展開係数 $<x'|\alpha>$ については

$$|<x'|\alpha>|^2\,dx' \tag{1.7.4}$$

が x' のまわりの狭い間隔 dx' 内に粒子を見出す確率である，と解釈される．我々の定式化での内積 $<x'|\alpha>$ が，状態 $|\alpha>$ での**波動関数** $\psi_\alpha(x')$ と普通よばれるものである：

$$<x'|\alpha> = \psi_\alpha(x'). \tag{1.7.5}$$

初等的な波動力学では，展開係数 $c_{\alpha'}(=<a'|\alpha>)$ に対する確率的解釈と波動関数 $\psi_\alpha(x')(=<x'|\alpha>)$ に対する確率的解釈を，しばしば別の仮定として提示する．もともとディラックによって行われた，本書で用いられ

る定式化の主な利点の一つは，この2種類の確率的解釈が統一されていることである．すなわち c_{α} と全く同じように，$\psi_{\alpha}(x')$ も展開係数なのである．[(1.7.3) 式を見よ]．ディラックの足跡をたどると，量子力学に備わる調和性を正しく理解することができる．

内積 $<\beta|\alpha>$ を考察しよう．$|x'>$ の完備性を用いると

$$<\beta|\alpha>=\int dx'<\beta|x'><x'|\alpha>=\int dx'\psi_{\beta}^{*}(x')\psi_{\alpha}(x') \tag{1.7.6}$$

となるので，$<\beta|\alpha>$ は二つの波動関数の重なりを特徴づける．しかし，$<\beta|\alpha>$ を重なり積分と定義しているのではないことに注意して欲しい．$<\beta|\alpha>$ が重なり積分と同じであるということは，$|x'>$ の完備性の要請から帰結されるのである．さらに一般的で表示にはよらない解釈によれば $<\beta|\alpha>$ は，状態 $|\beta>$ が状態 $|\alpha>$ の中に見出される確率振幅をあらわす．

今度は展開

$$|\alpha>=\sum_{a'}|a'><a'|\alpha> \tag{1.7.7}$$

を波動関数の言葉で解釈しよう．(1.7.7) 式の両辺に左から位置の固有ブラ $<x'|$ をかけると

$$<x'|\alpha>=\sum_{a'}<x'|a'><a'|\alpha> \tag{1.7.8}$$

となるが，波動力学の普通の記号を使うと，これは

$$\psi_{\alpha}(x')=\sum_{a'}c_{a'}u_{a'}(x')$$

と表せる．ここで演算子 A の，固有値 a' を持つ**固有関数**

$$u_{a'}(x')=<x'|a'> \tag{1.7.9}$$

を導入した．

ここで $<\beta|A|\alpha>$ が $|\alpha>$ と $|\beta>$ の波動関数を使うとどのように表わされるか調べよう．明らかに

$$
\begin{aligned}
<\beta|A|\alpha> &= \int dx' \int dx'' <\beta|x'><x'|A|x''><x''|\alpha> \\
&= \int dx' \int dx'' \psi_\beta^*(x') <x'|A|x''> \psi_\alpha(x'')
\end{aligned}
\tag{1.7.10}
$$

である．したがって $<\beta|A|\alpha>$ の値を求めるには，行列要素 $<x'|A|x''>$ を知らなければばならない．これは一般に 2 変数 x' および x'' の関数である．

もし観測量 A が位置演算子 x の関数であるとすると，この表式は著しく簡単になる．特に

$$
A = x^2 \tag{1.7.11}
$$

を考えよう．これは実際に調和振動子のハミルトニアンの中に出てくる項であり，第 2 章で議論される．(1.7.1) と (1.7.2) を使って

$$
<x'|x^2|x''> = (<x'|)\cdot(x''^2|x''>) = x'^2\delta(x'-x'') \tag{1.7.12}
$$

が得られる．したがって二重積分 (1.7.10) は一重積分になって

$$
\begin{aligned}
<\beta|x^2|\alpha> &= \int dx' <\beta|x'> x'^2 <x'|\alpha> \\
&= \int dx' \psi_\beta^*(x') x'^2 \psi_\alpha(x')
\end{aligned}
\tag{1.7.13}
$$

となる．一般に

$$
<\beta|f(x)|\alpha> = \int dx' \psi_\beta^*(x') f(x') \psi_\alpha(x') \tag{1.7.14}
$$

が成り立つ．上式の左辺にある $f(x)$ は演算子であるが，右辺の $f(x')$ は演算子でないことに注意して欲しい．

位置基底での運動量演算子

ここで運動量演算子が x-基底——すなわち基底ケットとして位置の固有ケットを使う表示——ではどのように見えるかを調べよう．出発点は，無限小平行移動の生成演算子としての運動量の定義である：

$$
\begin{aligned}
\left(1-\frac{ip\Delta x'}{\hbar}\right)|\alpha> &= \int dx' \mathscr{T}(\Delta x')|x'><x'|\alpha> \\
&= \int dx' |x'+\Delta x'><x'|\alpha> \\
&= \int dx' |x'><x'-\Delta x'|\alpha> \\
&= \int dx' |x'>\left(<x'|\alpha> - \Delta x' \frac{\partial}{\partial x'}<x'|\alpha>\right).
\end{aligned} \tag{1.7.15}
$$

両辺の比較により

$$
p|\alpha> = \int dx' |x'>\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}<x'|\alpha>\right) \tag{1.7.16}
$$

が，また直交性（1.7.2）を用いると

$$
<x'|p|\alpha> = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}<x'|\alpha> \tag{1.7.17}
$$

が得られる．また行列要素 p の x-表示として

$$
<x'|p|x''> = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'') \tag{1.7.18}
$$

が得られる．（1.7.16）からは特に重要な恒等式

$$
\begin{aligned}
<\beta|p|\alpha> &= \int dx' <\beta|x'>\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}<x'|\alpha>\right) \\
&= \int dx' \psi_\beta{}^*(x')\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi_\alpha(x')
\end{aligned} \tag{1.7.19}
$$

が得られる．我々の定式化では，(1.7.19) は仮定でない．それは，運動量の基本的性質を用いて導かれたのである．(1.7.17) を繰返し適用すると

$$< x'|p^n|\alpha > = (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n} < x'|\alpha >, \qquad (1.7.20)$$

$$< \beta|p^n|\alpha > = \int dx' \psi_\beta{}^*(x')(-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n} \psi_\alpha(x') \qquad (1.7.21)$$

を導くこともできる．

運動量空間の波動関数

今までもっぱら x-基底で話を進めてきた．実際には x と p との間には正準交換関係から推測できるように，——ときには符号が負になることはあっても——完全な対称性がある．そこで p-基底，即ち運動量表示で考えてみよう．

簡単のために，今度も1次元空間を用いる．p-基底での基底となる固有ケットは

$$p|p' > = p'|p' > \qquad (1.7.22)$$

および

$$< p'|p'' > = \delta(p' - p'') \qquad (1.7.23)$$

を満足する．運動量固有ケット $\{|p' >\}$ は，ちょうど位置固有ケット $\{|x' >\}$ と同じように，ケット空間を張る．したがって任意の状態ケット $|\alpha >$ は

$$|\alpha > = \int dp' |p' >< p'|\alpha > \qquad (1.7.24)$$

のように展開できる．この展開係数 $< p'|\alpha >$ に確率的解釈をつけることができる．つまり p を測定して固有値 p' が狭い範囲 dp' の間に得られる確率は

$|\langle p'|\alpha\rangle|^2\,dp'$ である．$\langle p'|\alpha\rangle$ を慣習上，**運動量空間の波動関数**と呼ぶ．しばしば $\phi_\alpha(p')$ という記号が用いられる：

$$\langle p'|\alpha\rangle = \phi_\alpha(p'). \tag{1.7.25}$$

$|\alpha\rangle$ が規格化されていると

$$\int dp' \langle\alpha|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle = \int dp' |\phi_\alpha(p')|^2 = 1 \tag{1.7.26}$$

が得られる．

ここで x-表示と p-表示の関連をつけておこう．離散的スペクトルの場合を思い出すと，元の組 $\{|a'\rangle\}$ から新しい組 $\{|b'\rangle\}$ への基底の変更は，変換行列（1.5.7）によって記述されている．今も同じように，必要な情報は $\langle x'|p'\rangle$ に含まれていると期待する．$\langle x'|p'\rangle$ は x' と p' の関数で，普通 x-表示から p-表示への**変換関数**と呼ばれる．$\langle x'|p'\rangle$ の具体的な表式を導くのに，まず（1.7.17）を用いよう．$|\alpha\rangle$ を運動量の固有ケット $|p'\rangle$ にすると

$$\langle x'|p|p'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle \tag{1.7.27}$$

すなわち

$$p'\langle x'|p'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle \tag{1.7.28}$$

が得られる．$\langle x'|p'\rangle$ に対するこの微分方程式の解は

$$\langle x'|p'\rangle = N\exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \tag{1.7.29}$$

で，N はすぐあとに決める規格化定数である．変換関数 $\langle x'|p'\rangle$ は x' と p' の2変数の関数ではあるが，仮にこれを，p' を固定して x' の関数と考えよう．するとこれは，固有値 p' の運動量固有状態において，位置 x' に粒子を見

出す確率振幅とみなすことができる．いいかえればこれはちょうど，運動量固有状態 $|p'\rangle$ をあらわす波動関数で，しばしば（x-空間での）運動量固有関数といわれる．したがって（1.7.29）は，運動量固有状態の波動関数が平面波であることを示している．面白いことにこの平面波の解は（未だ書き下していない）シュレーディンガー方程式を解かずに得られている．

規格化常数 N を求めるのに，まず

$$\langle x'|x''\rangle = \int dp' \langle x'|p'\rangle\langle p'|x''\rangle \tag{1.7.30}$$

を考えよう．左辺は $\delta(x'-x'')$ にあたる．右辺は $\langle x'|p'\rangle$ の具体的な形を使って計算でき

$$\begin{aligned}\delta(x'-x'') &= |N|^2\int dp' \exp\left[\frac{ip'(x'-x'')}{\hbar}\right] \\ &= 2\pi\hbar|N|^2\delta(x'-x'')\end{aligned} \tag{1.7.31}$$

となる．慣行に習い N を正の実数に選ぶと，結局

$$\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \tag{1.7.32}$$

が得られる．

ここで，位置空間の波動関数が運動量空間の波動関数とどのように関連しているかを示すことができる．そのためになすべきことは，ただ単に

$$\langle x'|\alpha\rangle = \int dp' \langle x'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle \tag{1.7.33a}$$

と

$$\langle p'|\alpha\rangle = \int dx' \langle p'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \tag{1.7.33b}$$

とを

$$\psi_\alpha(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \phi_\alpha(p') \qquad (1.7.34a)$$

と

$$\phi_\alpha(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' \exp\left(\frac{-ip'x'}{\hbar}\right) \psi_\alpha(x') \qquad (1.7.34b)$$

とに書き変えればよい．この一対の等式はちょうど，フーリエの反転定理から期待されるものと同じである．こうして見ると今迄我々が展開して来た数学は，積分変換に関するフーリエの業績をどうやら“知っていた”かのようである．

ガウスの波束

我々の基礎的な論理形式を説明するために，物理的な例を調べるのは有益である．いわゆる**ガウスの波束**を考えよう．その x-空間での波動関数は

$$<x'|\alpha> = \left[\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{d}}\right] \exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right] \qquad (1.7.35)$$

で与えられる．これは波数 k の平面波が，原点に中心を持つガウス型の包絡線で変調されたものである．粒子を観測する確率は，$|x'| > d$ で急激にゼロになる．もっと定量的にいうと，確率密度 $|<x'|\alpha>|^2$ は，幅 d のガウス型をしている．

ここで x, x^2, p および p^2 の期待値を計算しよう．x の期待値は，対称性によって明らかにゼロである：

$$\begin{aligned} <x> &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' <\alpha|x'> x' <x'|\alpha> = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |<x'|\alpha>|^2 x' \\ &= 0 . \end{aligned} \qquad (1.7.36)$$

x^2 については

$$<x^2> = \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 |<x'|\alpha>|^2$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}\, d} \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 \exp\left(- \frac{x'^2}{d^2} \right)$$

$$= \frac{d^2}{2} \tag{1.7.37}$$

であるから，位置演算子の分散として

$$<(\Delta x)^2> = <x^2> - <x>^2 = \frac{d^2}{2} \tag{1.7.38}$$

が導かれる．p と p^2 の期待値も次のように計算できる：

$$<p> = \hbar k, \tag{1.7.39a}$$

$$<p^2> = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2. \tag{1.7.39b}$$

これらを導き出すことは練習問題としておく．したがって運動量の分散は

$$<(\Delta p)^2> = <p^2> - <p>^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2} \tag{1.7.40}$$

で与えられる．(1.7.38) と (1.7.40) があればハイゼンベルクの不確定関係 (1.6.34) が確かめられる．この場合に不確定さの積は，d に拘わりなく

$$<(\Delta x)^2><(\Delta p)^2> = \frac{\hbar^2}{4} \tag{1.7.41}$$

で与えられ，したがってガウスの波束に関しては，より一般的な不等式 (1.6.34) でなく，実際に等式が成り立つのである．このために，ガウスの波束はよく最小不確定波束と呼ばれる．

ここで運動量空間に移ろう．積分は――指数関数の肩に平方が出るようにして――ただちに実行でき

$$<p'|\alpha> = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right) \left(\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{d}} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp\left(\frac{-ip'x'}{\hbar} + ikx' \right.$$

$$
-\frac{x'^2}{2d^2}\Bigr)
$$

$$
=\sqrt{\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}}\exp\left[-\frac{(p'-\hbar k)^2d^2}{2\hbar^2}\right] \qquad (1.7.42)
$$

が得られる．この運動量空間の波動関数からも同様の方法で，$\langle p\rangle$ や $\langle p^2\rangle$ が求められるが，これも演習問題に残しておこう．

運動量 p' の粒子を見出す確率は，$\hbar k$ を中心とする（運動量空間の）ガウス関数であり，ちょうど x' に粒子を見出す確率が，原点を中心とする（位置空間の）ガウス関数であるのと同様である．さらに二つのガウス関数の幅は，互いに反比例している．これもまた，不確定さの積 $\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle$ が（1.7.41）で具体的に計算したように一定であることを表わしている．p-空間で幅が広ければ広い程，x-空間での幅は狭まり，またその逆も成り立つ．

極端な例として，$d\to\infty$ にしたとしよう．位置空間の波動関数（1.7.35）は，全空間に拡がる平面波となる．粒子を見出す確率は，x' によらず一定である．これにひきかえ，運動量空間の波動関数は δ-関数的であり，$\hbar k$ に鋭くそびえている．反対の極限で $d\to 0$ とすると，原点に δ-関数的に局在する位置空間の波動関数が得られるが，運動量の波動関数（1.7.42）は p' によらず一定である．

極端に局在した（x-空間の）状態は，すべての可能な運動量固有状態の重ね合わせと見なせることが分かった．運動量が mc と同程度かこれを越えるような運動量固有状態でさえも，重ね合わせの中に含めなければならない．しかしこのように大きな運動量の値では，非相対論的量子力学に基づく記述はだめになってしまう*．こうした制限があるものの，位置の固有ケット $|x'\rangle$ が存在することに基づく我々の定式化には，広い適用領域がある．

* 相対論的量子力学での局在状態の概念は，“負のエネルギー状態”すなわち対生成が可能なために，実はもっとずっと込み入っている．（Sakurai 1967, pp. 118-19）

3次元への一般化

今迄この節では簡単のために，もっぱら1次元空間を調べてきたが，行ってきたことはすべて，必要な修正をすれば3次元空間へ一般化できる．用いる基底ケットは

$$\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'> = \boldsymbol{x}'|\boldsymbol{x}'> \tag{1.7.43}$$

を満足する位置の固有ケットであってもよいし

$$\boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}'> = \boldsymbol{p}'|\boldsymbol{p}'> \tag{1.7.44}$$

を満足する運動量の固有ケットでもよい．これらは規格化条件

$$<\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{x}''> = \delta^3(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}'') \tag{1.7.45a}$$

および

$$<\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{p}''> = \delta^3(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}'') \tag{1.7.45b}$$

に従う．δ^3 は3次元の δ-関数

$$\delta^3(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}'') = \delta(x' - x'')\delta(y' - y'')\delta(z' - z'') \tag{1.7.46}$$

を表わす．完備関係式は

$$\int d^3x'|\boldsymbol{x}'><\boldsymbol{x}'| = 1 \tag{1.7.47a}$$

および

$$\int d^3p'|\boldsymbol{p}'><\boldsymbol{p}'| = 1 \tag{1.7.47b}$$

と表わされ，任意の状態ケットの展開に用いられる：

$$|\alpha> = \int d^3x'|\boldsymbol{x}'><\boldsymbol{x}'|\alpha>, \tag{1.7.48a}$$

$$|\alpha\rangle = \int d^3p' |\mathbf{p}'\rangle\langle \mathbf{p}'|\alpha\rangle. \tag{1.7.48b}$$

展開係数 $\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle$ および $\langle \mathbf{p}'|\alpha\rangle$ は，それぞれ位置空間および運動量空間の波動関数，$\psi_\alpha(\mathbf{x}')$ および $\phi_\alpha(\mathbf{p}')$ と同じである．

運動量演算子の行列要素を $|\beta\rangle$ と $|\alpha\rangle$ の間でとると

$$\langle\beta|\mathbf{p}|\alpha\rangle = \int d^3x' \psi_\beta^*(\mathbf{x}')(-i\hbar\nabla)\psi_\alpha(\mathbf{x}') \tag{1.7.49}$$

となる．(1.7.32) と類似の変換関数は

$$\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\right]\exp\left(\frac{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'}{\hbar}\right) \tag{1.7.50}$$

であるから

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}') = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\right]\int d^3p' \exp\left(\frac{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'}{\hbar}\right)\phi_\alpha(\mathbf{p}') \tag{1.7.51a}$$

および

$$\phi_\alpha(\mathbf{p}') = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\right]\int d^3x' \exp\left(-\frac{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'}{\hbar}\right)\psi_\alpha(\mathbf{x}') \tag{1.7.51b}$$

が得られる．

波動関数の次元を調べるのは面白い．1次元の問題では規格化の要請 (1.6.8) から，$|\langle x'|\alpha\rangle|^2$ が長さの逆数の次元を持つので，波動関数自身は (長さ)$^{-\frac{1}{2}}$ の次元を持たなければならないことがわかる．対照的に，3次元の問題の波動関数は，$|\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle|^2$ を全空間で積分すると1 (無次元) でなければならないので，(長さ)$^{-\frac{3}{2}}$ の次元を持たなければならない．

問　　題

1．次式を証明せよ．

$$[AB, CD] = -AC\{D, B\} + A\{C, B\}D - C\{D, A\}B + \{C, A\}DB.$$

2．2×2行列 X（エルミート的ともユニタリー的とも限らない）が，a_0，a_k（$k=1$，2，3）を数として

$$X = a_0 + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}$$

のように書けるとしよう．

a．a_0 および a_k（$k=1$，2，3）は $\mathrm{tr}(X)$ および $\mathrm{tr}(\sigma_k X)$ とどのような関係にあるか．

b．a_0 および a_k を行列要素 X_{ij} を用いて表わせ．

3．2×2行列 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}$ の行列式は

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a} \longrightarrow \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}' \equiv \exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi}{2}\right)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi}{2}\right)$$

の下で不変であることを示せ．$\hat{\boldsymbol{n}}$ が z-軸の正方向を向いているとき，a'_k を a_k を用いて表わし，その結果を解釈せよ．

4．ブラ-ケット代数の規則を用い，次式を証明あるいは計算せよ．

a．X と Y を演算子とするとき，$\mathrm{tr}(XY)=\mathrm{tr}(YX)$；

b．X と Y を演算子とするとき，$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$；

c．A がエルミート演算子でその固有値が分かっているとき，$\exp[if(A)]$ のケット-ブラ形式；

d．$\psi_{a'}(\boldsymbol{x}')=\langle \boldsymbol{x}' \mid a'\rangle$ のとき，$\sum_{a'}\psi_{a'}^*(\boldsymbol{x}')\psi_{a'}(\boldsymbol{x}'')$．

5．a．二つのケット $|\alpha>$，$|\beta>$ を考える．基底ケットの完全系を作る $|a'>$，$|a''>$，…に対して，$<a'|\alpha>$，$<a''|\alpha>$，…および $<a'|\beta>$，$<a''|\beta>$…がすべて分かっているとする．この基底で演算子 $|\alpha><\beta|$ の行列表現を求めよ．

b．次にスピン $\frac{1}{2}$ の系を考え，$|\alpha>$ と $|\beta>$ をそれぞれ $|S_z=\hbar/2>$ と $|S_x=\hbar/2>$ とする．$|\alpha><\beta|$ に対応する正方行列を，通常の基底（S_zが対角的）で具体的に書き下せ．

6．$|i>$ と $|j>$ をあるエルミート演算子 A の固有ケットとする．どのよう

な条件の下で，$|i>+|j>$ もまた A の固有ケットであるといえるか．答が正しいことを説明せよ．

7．エルミート演算子 A の固有ケット $\{|a'>\}$ で張られるケット空間を考える．縮退はないとする．

a.
$$\prod_{a'}(A-a')$$
は零演算子であることを証明せよ．

b.
$$\prod_{a''\neq a'}\frac{(A-a'')}{(a'-a'')}$$
はどのような意味のある演算子か．

c. A をスピン 1/2 の系の S_z に等しいと置き，(a) と (b) を説明せよ．

8．$|+>$ と $|->$ の規格直交性を用い

$$[S_i,\ S_j]=i\varepsilon_{ijk}\hbar S_k,\ \{S_i,\ S_j\}=\left(\frac{\hbar^2}{2}\right)\delta_{ij}$$

を証明せよ．ここで

$$S_x=\frac{\hbar}{2}(|+><-|+|-><+|),$$

$$S_y=\frac{i\hbar}{2}(-|+><-|+|-><+|),$$

$$S_z=\frac{\hbar}{2}(|+><+|-|-><-|)$$

である．

9．図に示した角度方向にある $\hat{\boldsymbol{n}}$ に対し，$|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+>$ を

$$\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+>=\left(\frac{\hbar}{2}\right)|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+>$$

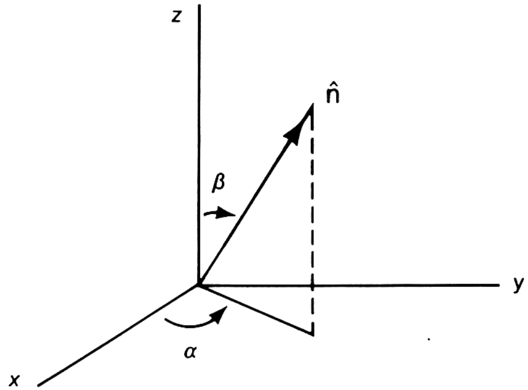
となるように作れ．答を $|+>$ と $|->$ の線形結合として表わせ．

[注意：答は

$$\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)|+>+\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{i\alpha}|->$$

であるが，単にこの答が上の固有値方程式を満たすことを確かめるだけで

はいけない．問題を正面から固有値問題として扱うこと．また本書で後に導く回転演算子を用いてはならない．］



10. 2準位系のハミルトン演算子が，a をエネルギーの次元の数として，

$$H = a(|1><1| - |2><2| + |1><2| + |2><1|)$$

で与えられている．このエネルギー固有値と，対応するエネルギー固有ケットを（$|1>$ と $|2>$ の線形結合として）見出せ．

11. ある2準位系がハミルトニアン

$$H = H_{11}|1><1| + H_{22}|2><2| + H_{12}[|1><2| + |2><1|]$$

で記述されている．H_{11}，H_{22} および H_{12} はエネルギーの次元の実数で，$|1>$ と $|2>$ は H とは異なるある観測量の固有ケットである．エネルギー固有ケットと，対応するエネルギー固有値を求めよ．答の正しいことを $H_{12} = 0$ に対して確かめよ．（全く初めから問題を解く必要はない．次のことを証明なしに使ってよい：

$$(\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})|\hat{\boldsymbol{n}};+> = \frac{\hbar}{2}|\hat{\boldsymbol{n}};+>$$

を満たす $|\hat{\boldsymbol{n}};+>$ は

$$|\hat{\boldsymbol{n}};+> = \cos\frac{\beta}{2}|+> + e^{i\alpha}\sin\frac{\beta}{2}|->$$

で与えられる．β と α はそれぞれ z-軸となす角と方位角であり $\hat{\boldsymbol{n}}$の方向を表わす．)

12. スピン $\frac{1}{2}$ の系が $\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$ の固有状態にあり，その固有値は $\hbar/2$であることが分かっている．ここで $\hat{\boldsymbol{n}}$ は xz-平面内の単位ベクトルで，z-軸の正方向と γ の角度をなしている．

   a. S_x を測定したとする．$+\hbar/2$ の値が得られる確率はいくらか．

   b. S_x の分散，$<(S_x-<S_x>)^2>$ を計算せよ．($\gamma=0$, $\pi/2$, π の特別な場合に答があっているかどうか確かめよ．)

13. スピン $\frac{1}{2}$ の原子線が，一続きのシュテルン・ゲルラッハ型測定装置を次のように通過する：

   a. 第1の測定では $s_z=\hbar/2$ の原子が選ばれ，$s_z=-\hbar/2$ の原子は除かれる．

   b. 第2の測定では $s_n=\hbar/2$ の原子が選ばれ，$s_n=-\hbar/2$の原子が除かれる．ここで s_n は演算子 $\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$ の固有値であり，$\hat{\boldsymbol{n}}$ は xz-平面内で z-軸と角度 β をなす．

   c. 第3の測定では $s_z=-\hbar/2$ の原子が選ばれ，$s_z=\hbar/2$ の原子が除かれる．

   第1の測定後に残った $s_z=\hbar/2$ の原子線の強度を1に規格化したとき，最後の $s_z=-\hbar/2$の原子線の強度はいくらか．最後の $s_z=-\hbar/2$ の原子線の強度を最大にするには，第2の装置をどの方向に向けなければならないか．

14. 量子力学のある観測量が，次のような 3×3 行列で表現されている：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

   a. この観測量の規格化された固有ベクトルと，対応する固有値を求めよ．

縮退はあるか.

b. このような観測量に対応する物理系の例をあげよ.

15. A, B を観測量とする. A と B の同時固有ケット $\{|a', b'>\}$ が, 基底ケットの完全な規格直交系を作るとする. このとき常に

$$[A, B] = 0$$

と結論できるであろうか. これを正しいとするなら, 証明を述べよ. 正しくないとするなら, 反例を与えよ.

16. 二つのエルミート演算子が, 反交換関係を満たす：

$$\{A, B\} = AB + BA = 0.$$

A と B の同時（すなわち共通）固有ケットはありうるか. 証明ないし例証を与えよ.

17. 時間にあからさまに依らない二つの観測量 A_1, A_2 が, 交換しないことが分かっている：

$$[A_1, A_2] \neq 0.$$

一方また A_1, A_2 は共にハミルトニアンと交換することも分かっている：

$$[A_1, H] = 0, [A_2, H] = 0.$$

このエネルギー固有状態は, 一般に縮退していることを示せ. 例外はあるか. 中心力の問題, $H = \mathbf{p}^2/2m + V(r)$ で, $A_1 \to L_z$, $A_2 \to L_x$ とした場合を, 例として考えるとよい.

18. a. シュヴァルツの不等式を最も簡単に導くには, 次のようにする. まず, 任意の複素数 λ に対して

$$(<\alpha| + \lambda^* <\beta|)\cdot(|\alpha> + \lambda|\beta>) \geqq 0$$

であることに着目する. 次にこの不等式がシュヴァルツの不等式になるように, λ を選ぶ.

b. 一般化された不確定関係の式で等号が成り立つのは, 問題とする状態が

$$\Delta A \mid \alpha> = \lambda \Delta B|\alpha>$$

を満たし，λ が純虚数である場合であることを示せ．

c. 波動力学の通常の規則を用いた計算により，ガウスの波束の波動関数

$$< x'|\alpha> = (2\pi d^2)^{-1/4} \exp\left[\frac{i<p>x'}{\hbar} - \frac{(x'-<x>)^2}{4d^2}\right]$$

は，最小不確定関係

$$\sqrt{<(\Delta x)^2>}\sqrt{<(\Delta p)^2>} = \frac{\hbar}{2}$$

を満たすことが示せる．このガウスの波束に対しては，(b) で示した条件と一致して

$$<x' \mid \Delta x \mid \alpha> = (\text{純虚数}) < x'|\Delta p|\alpha>$$

の要請が，実際に満たされていることを証明せよ．

19. a. 期待値を S_z+ 状態に対してとり

$$<(\Delta S_x)^2> \equiv <S_x^2> - <S_x>^2$$

を計算せよ．この結果を用い，一般化された不確定関係

$$<(\Delta A)^2><(\Delta B)^2> \geqq \frac{1}{4}|<[A,\ B]>|^2$$

が，$A \to S_x$，$B \to S_y$ と置いて成り立つことを確かめよ．

b. S_x+ 状態に対して，$A \to S_x$，$B \to S_y$ とした不確定関係が成り立つことを確かめよ．

20. 不確定積

$$<(\Delta S_x)^2><(\Delta S_y)^2>$$

を最大にする，$|+>$ ケットと $|->$ ケットの線形結合を見出せ．見出された線形結合に対して，S_x と S_y の不確定関係が破られないことを実際に確かめよ．

21. 2枚の堅い壁

$$V = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{それ以外} \end{cases}$$

に閉じこめられた1次元の粒子に対して，x-p の不確定積 $\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle$ を計算せよ．基底状態ならびに励起状態に関して計算せよ．

22. 氷割りのきりが，きり先を下にしてつりあいが保てる時間を，ハイゼンベルクの不確定原理だけが制限であるとき，大雑把に見積れ．きり先はとがっていて，きり先ときり先をのせている表面は堅いとせよ．結果の大きさの程度を大幅に変えないような近似を用いてよい．氷割りのきりの寸法と重さは，適当な値を仮定せよ．大体の数値を求め，答えを秒単位で表わせ．

23. 3次元のケット空間を考える．基底ケットとしてある規格直交ケット——例えば $|1\rangle$，$|2\rangle$，$|3\rangle$ ——を用いたとき，演算子 A および B が，a，b を共に実数として

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix}$$

で表現されている．

a. 明らかに A は縮退したスペクトルを示す．B もやはり縮退したスペクトルを示すであろうか．

b. A と B は交換することを示せ．

c. A と B の両方の同時固有ケットである，新しい規格直交ケットの組を見出せ．その三つの固有ケットのそれぞれに対して，A と B の固有値を決定せよ．こうして得た固有値は，それぞれの固有ケットを完全に特徴づけるか．

24. a. 2成分スピノルにかかる $(1/\sqrt{2})(1 + i\sigma_x)$ は，x 軸のまわりの角度 $-\pi/2$ の回転演算子の行列表現とみなせることを証明せよ．（マイナスの符号は回転が時計方向であることを示している．）

b. S_y の固有ケットを基底ベクトルとして用いて，S_z の行列表現を作れ．

25. すべての行列要素 $< b' \mid A \mid b'' >$ が，ある表示（この場合には $\{ \mid b' > \}$ の基底）で実数であるとき，演算子が実演算子であると定義する人達がいる．この定義は表示によらないのであろうか．すなわち $\{ \mid b' > \}$ と異なるある基底を用いても，行列要素は依然として実数であろうか．よく知っている演算子 S_y および S_z（問題24参照）あるいは x および p_x を用いて，読者の答を確かめよ．

26. S_z を対角的にする基底と S_x を対角的にする二つの基底を結ぶ変換行列を作れ．答が一般的関係式

$$U = \sum_r \mid b^{(r)} >< a^{(r)} \mid$$

と一致することを示せ．

27. a. $f(A)$ を，$A \mid a' > = a' \mid a' >$ の性質を持つエルミート演算子 A の関数と仮定する．a' 基底から b' 基底への変換行列が分かっているとき，$< b'' \mid f(A) \mid b' >$ を計算せよ．

b. (a) で得られた結果を類推して連続変数の場合に

$$< \boldsymbol{p}'' \mid F(r) \mid \mid \boldsymbol{p}' >$$

を計算せよ．できるだけ簡単な表式で表わせ．r は $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ であり，x, y, z は演算子であることに注意せよ．

28. a. x と p_x を1次元の位置座標と運動量とする．古典的なポアソンかっこ式

$$[\, x, F(p_x)]_{古典的}$$

を計算せよ．

b. 今度は x と p_x を対応する量子力学的演算子とする．交換子

$$\left[\, x, \exp\left(\frac{i p_x a}{\hbar}\right) \right]$$

を計算せよ．

c. (b) で得られた結果を用いて，

$$\exp\left(\frac{ip_x a}{\hbar}\right)|\,x'>,\quad (x|x'> = x'|x'>)$$

が位置座標演算子 x の固有状態であることを証明せよ．対応する固有値はいくらか．

29. a. Gottfried（1966）の 247 ページには

$$[\,x_i,\ G(\boldsymbol{p})\,] = i\hbar\frac{\partial G}{\partial p_i},\qquad [\,p_i,\ F(\boldsymbol{x})\,] = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial x_i}$$

が基本的な交換関係から“容易に導ける”と書いてある．ここで F, G はそれぞれの変数の級数で表わされる任意の関数とする．このことを確かめよ．

b. $[\,x^2,\ p^2\,]$ を計算せよ．その結果を古典的なポアソンかっこ式 $[\,x^2,\ p^2\,]_{古典的}$ と比較せよ．

30. 有限の（空間的）変位を行う平行移動演算子は，$\boldsymbol{p}$ を運動量の演算子として

$$\mathscr{T}(\boldsymbol{l}) = \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}}{\hbar}\right)$$

で与えられる．

a.

$$[\,x_i,\ \mathscr{T}(\boldsymbol{l})\,]$$

を計算せよ．

b. (a) または他の式を用いて，期待値 $<\boldsymbol{x}>$ が平行移動によりどのように変化するかを示せ．

31. 本文では $\mathscr{T}(dx')$ の，位置ならびに運動量固有ケットに対する効果，およびさらに一般的な状態ケット $|\alpha>$ に対する効果を議論した．無限小平行移動のもとでの期待値 $\langle\boldsymbol{x}\rangle$ ならびに $\langle\boldsymbol{p}\rangle$ のふるまいも調べることができる．(1.6.25), (1.6.45) および $|\,\alpha> \to \mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')|\alpha>$ のみを用いて，無限小平行移動の結果，$\langle\boldsymbol{x}\rangle \to \langle\boldsymbol{x}\rangle + d\boldsymbol{x}'$, $\langle\boldsymbol{p}\rangle \to \langle\boldsymbol{p}\rangle$ となることを示せ．

32. a. ガウスの波束（1.7.35）に対して，p と p^2 の期待値が（1.7.39 a）と（1.7.39 b）になることを確かめよ．

b. 運動量空間の波動関数（1.7.42）を用いて，p と p^2 の期待値を計算せよ．

33. a. 次式を証明せよ．

(i) $$< p' \mid x | \alpha > = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p' \mid \alpha \rangle$$

(ii) $$< \beta \mid x \mid \alpha > = \int dp' \phi_\beta^* (p') \, i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha (p')$$

ここで $\phi_\alpha (p') = < p' \mid \alpha >$ および $\phi_\beta (p') = < p' | \beta >$ は運動量空間の波動関数である．

b. x を位置演算子，Ξ を運動量の次元を持つある数とするとき

$$\exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)$$

の持つ物理的意味は何か．理由をつけて答えよ．

第2章

量子ダイナミックス

これまで我々は，物理系が時間とともにどう変化するのか議論しなかった．この章ではもっぱら，状態ケットや観測量の力学的発展を扱う．いいかえればここで扱うのは，ニュートン（またはラグランジュあるいはハミルトン）の運動方程式に類似した，量子力学の運動方程式である．

2.1 時間的発展とシュレーディンガー方程式

心に留めておく第一の要点は，量子力学で時間は単にパラメータであり演算子ではないということである．特に，時間は前章で述べたような意味での観測量ではない．位置演算子というのと同じように時間演算子といっては無意味である．皮肉なことに波動力学が発展する歴史の途上で，L. ド・ブロイもE. シュレーディンガーも一方ではエネルギーと時間，他方では運動量と位置（空間座標）の間にある一種の共変的な類似に導かれてきた．しかし現在我々が完成された形の量子力学を見ると，時間と空間はいささかも対称的に取扱われていないことが分かる．相対論的場の理論では，時間・空間の座標を同じ資格で扱うが，それは位置という量を観測量という地位から単なるパラメータとしての地位にひきおろしてのことである．

時間的発展の演算子

この節で扱う基本的課題は，状態ケットが時間と共にどう変化するかである．ある物理系の状態ケットが，時刻 t_0 で $|\alpha\rangle$ によって表わされていた

としよう．その後も系が同じ状態 $|\alpha>$ に留まることは一般に期待できない．後のある時刻 t における状態に対応するケットを

$$|\alpha,\ t_0\,;\,t> \qquad (t>t_0) \tag{2.1.1}$$

で表わすことにしよう．ここで α, t_0 と書いたのは，はじめの基準になる時刻 t_0 で系が状態 $|\alpha>$ にあったということを示すためである．時間は連続パラメータであるから

$$\lim_{t\to t_0}|\alpha,\ t_0\,;\,t> = |\alpha> \tag{2.1.2}$$

が期待でき，またこれを簡単に

$$|\alpha,\ t_0\,;\,t_0> = |\alpha,\ t_0> \tag{2.1.3}$$

と略記してもよいであろう．基本的課題は状態ケットの時間的発展を調べることである：

$$|\alpha,\ t_0> = |\alpha> \xrightarrow{\text{時間的発展}} |\alpha,\ t_0\,;\,t>. \tag{2.1.4}$$

いいかえれば，我々に興味があるのは時間が $t_0 \to t$ と推移していくとき，状態ケットがどう変化するかである．

二つのケットは，平行移動の場合と同じように，**時間的発展の演算子**と呼ばれる演算子 $\mathcal{U}(t,\ t_0)$ によって

$$|\alpha,\ t_0\,;\,t> = \mathcal{U}(t,\ t_0)|\alpha,\ t_0> \tag{2.1.5}$$

のように関係づけられる．ではこの時間的発展の演算子にどのような性質を持たせたらよいであろうか．第一に確率保存の条件から $\mathcal{U}(t,\ t_0)$ はユニタリーでなければならない．時刻 t_0 でこの状態ケットがある観測量 A の固有ケットによって展開されているとしよう：

$$|\alpha,\ t_0> = \sum_{a'} c_{a'}(t_0)|a'>. \tag{2.1.6}$$

同じように，後のある時刻で

$$|\alpha,\ t_0\,;t\rangle=\sum_{a'}c_{a'}(t)|a'\rangle \tag{2.1.7}$$

とする．一般にそれぞれの展開係数の絶対値が同じままであることは期待できない*：

$$|c_{a'}(t)|\neq|c_{a'}(t_0)|. \tag{2.1.8}$$

例えば z-方向にかけた均一磁場中にある，スピン磁気モーメントをもつスピン1/2の系を考えよう．議論を明確にするために時刻 t_0 でスピンは $+x$ 方向を向いていたとしよう．すなわち系は，S_x の固有値が $\hbar/2$の固有状態に見出される．この節で後ほど定量的に示すことにするが，時間経過と共にスピンは xy- 平面内を回転する．すなわち $t>t_0$ では S_x+ を観測する確率はもはや 1 でなく，S_x- を観測する確率も有限となる．しかし S_x+ と S_x- の確率の和は常に 1 である．表式（2.1.6）と（2.1.7）で，個々の展開係数については（2.1.8）が成り立つが，一般的に

$$\sum_{a'}|c_{a'}(t_0)|^2=\sum_{a'}|c_{a'}(t)|^2 \tag{2.1.9}$$

でなければならない．いいかえれば，もしはじめに状態ケットが 1 に規格されていたなら，その後ずっと 1 に規格されていなければならない：

$$\langle\alpha,\ t_0|\alpha,\ t_0\rangle=1\Rightarrow\langle\alpha,\ t_0\,;t|\alpha,\ t_0\,;t\rangle=1. \tag{2.1.10}$$

平行移動の場合と同様に，この性質は時間的発展の演算子をユニタリーとすれば保証される．そこで，$\mathcal{U}$ 演算子の最も基本的な性質の一つとしてユニタリー性

---

* 後に示すように，ハミルトニアンが A と交換するときは，$|c_{a'}(t)|$ と $|c_{a'}(t_0)|$ とが実際に等しくなる．

$$\mathscr{U}^{\dagger}(t,\ t_0)\mathscr{U}(t,\ t_0)=\mathscr{U}(t,\ t_0)\mathscr{U}^{\dagger}(t,\ t_0)=1 \tag{2.1.11}$$

を要請しよう．多くの人達がユニタリー性を確率の保存と同じ意味にとっているのは偶然のことでない．

演算子 $\mathscr{U}$ に要請する他の一つの特性は合成の性質

$$\mathscr{U}(t_2,\ t_0)=\mathscr{U}(t_2,\ t_1)\mathscr{U}(t_1,\ t_0), \quad (t_2>t_1>t_0) \tag{2.1.12}$$

である．この方程式の意味は，t_0 から t_2 への時間発展を得るのに，はじめに t_0 から t_1 への時間発展を考え，続いて t_1 から t_2 への発展を考えても同じ結果が得られるということで，きわめてもっともな要請である．(2.1.12) は右から左へ読むことに注意しよう！

さらに，無限小の時間的発展の演算子 $\mathscr{U}(t_0+dt,\ t_0)$

$$|\alpha,\ t_0;t_0+dt\rangle=\mathscr{U}(t_0+dt,\ t_0)|\alpha,\ t_0\rangle \tag{2.1.13}$$

を考えるのが便利であることが分かる．連続性により[(2.1.2) 式参照]無限小の時間的発展の演算子は dt をゼロにすると，恒等演算子

$$\lim_{dt\to 0}\mathscr{U}(t_0+dt,\ t_0)=1 \tag{2.1.14}$$

となる．そこで，平行移動演算子の場合と同様に $\mathscr{U}(t_0+dt,\ t_0)$ と 1 との差を dt の 1 次のオーダーと期待しよう．

こうした要請は次のように書くことで満たされる：

$$\mathscr{U}(t_0+dt,\ t_0)=1-i\Omega dt. \tag{2.1.15}$$

ここで Ω はエルミート演算子*

$$\Omega^{\dagger}=\Omega \tag{2.1.16}$$

---

* 演算子 Ω が時間にあからさまに依存するときは，t_0での値を用いる．

である．(2.1.15) により，この無限小の時間的発展の演算子は合成の性質

$$\mathcal{U}(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0) = \mathcal{U}(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0 + dt_1)\mathcal{U}(t_0 + dt_1, t_0) \tag{2.1.17}$$

を満たす．恒等演算子との差は dt のオーダーである．またユニタリー性は，$(dt)^2$ およびそれ以上のオーダーは無視することにして

$$\mathcal{U}^\dagger(t_0 + dt, t_0)\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = (1 + i\Omega^\dagger dt)(1 - i\Omega dt) \simeq 1 \tag{2.1.18}$$

のように確かめられる．

演算子 Ω は振動数，すなわち時間の逆数の次元を持つ．よくあらわれる観測量で振動数の次元を持つものはないだろうか．前期量子論で角振動数 ω がプランク・アインシュタインの関係式

$$E = \hbar\omega \tag{2.1.19}$$

によってエネルギーに関連すると要請したことを思い起こそう．ここで，ハミルトニアンは時間的発展の生成演算子（母関数，あるいは生成母関数）であるという考えを，古典力学から借用しよう．(Goldstein 1980, pp. 407–408)．そうすれば Ω をハミルトン演算子 H に

$$\Omega = H/\hbar \tag{2.1.20}$$

のように関係づけることが自然である．

要約すると，無限小の時間的発展の演算子は

$$\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - iHdt/\hbar \tag{2.1.21}$$

と書ける．ここで H はハミルトン演算子であり，エルミート的と仮定する．読者はここで導入した $\hbar$ は平行移動演算子 (1.6.32) の表式にあらわれた $\hbar$ と同じものかどうか疑問に思われるかも知れない．この問の答は，後に導く量子論の運動方程式を，古典論の運動方程式と比較することによって得られる．

二つの $\hbar$ を同じに取らない限り，量子力学の関係式の古典的極限として

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \tag{2.1.22}$$

のような関係式が得られないことがわかる.

シュレーディンガー方程式

以上の事柄を使うと，時間的発展の演算子 $\mathcal{U}(t,\ t_0)$ に対する基本的な微分方程式が導ける．時間的発展の演算子の合成の性質を用い，(2.1.12) 式中で $t_1 \to t$, $t_2 \to t+dt$ と置けば

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(t+dt,\ t_0) &= \mathcal{U}(t+dt,\ t)\mathcal{U}(t,\ t_0)\\ &= (1 - iHdt/\hbar)\mathcal{U}(t,\ t_0)\end{aligned} \tag{2.1.23}$$

となる．ここで時間差 $t - t_0$ は必ずしも無限小である必要はない．したがって

$$\mathcal{U}(t+dt,\ t_0) - \mathcal{U}(t,\ t_0) = -i(H/\hbar)dt\mathcal{U}(t,\ t_0) \tag{2.1.24}$$

であるが，これは微分方程式の形

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}(t,\ t_0) = H\mathcal{U}(t,\ t_0) \tag{2.1.25}$$

に書き換えられる．これが**時間的発展の演算子に対するシュレーディンガー方程式**である．時間的発展に関するすべてがこの最も基本的な方程式から導ける．

式 (2.1.25) によってただちに状態ケットに対するシュレーディンガー方程式が導ける．(2.1.25) の両辺に右から $|\alpha,\ t_0\rangle$ をかけると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}(t,\ t_0)|\alpha,\ t_0\rangle = H\mathcal{U}(t,\ t_0)|\alpha,\ t_0\rangle \tag{2.1.26}$$

が得られるが，$|\alpha,\ t_0\rangle$ は t に依存しないのでこれは

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,\ t_0;t\rangle = H|\alpha,\ t_0;t\rangle \tag{2.1.27}$$

と同じである．ここで（2.1.5）を用いた．

$\mathcal{U}(t, t_0)$ が与えられさらに $\mathcal{U}(t, t_0)$ が初期状態ケット $|\alpha, t_0>$ にどう作用するか分かると，状態ケットのシュレーディンガー方程式（2.1.27）にかかわる必要はない．$\mathcal{U}(t, t_0)$ を $|\alpha, t_0>$ にかけさえすればよい．こうして任意の時刻 t での状態ケットを得ることができる．したがって第一の課題は時間的発展の演算子に対するシュレーディンガー方程式（2.1.25）の形式解を導くことである．三つの場合を別々に扱おう．

第1の場合．ハミルトン演算子は，時間に依存しない．すなわち，たとえパラメータ t が変化しても H 演算子は変化しない．この例として時間的に一定な磁場と相互作用しているスピン磁気モーメントのハミルトニアンがある．（2.1.25）の解はこの場合

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp[-iH\cdot(t-t_0)/\hbar] \qquad (2.1.28)$$

となる．これを証明するために，右辺を展開すると

$$\exp[-iH\cdot(t-t_0)/\hbar] = 1 - iH\cdot(t-t_0)/\hbar + \left[\frac{(-i)^2}{2}\right][H\cdot(t-t_0)/\hbar]^2 + \cdots\cdots \qquad (2.1.29)$$

となる．この展開式の時間微分は

$$\frac{\partial}{\partial t}\exp[-iH\cdot(t-t_0)/\hbar] = -iH/\hbar + \frac{(-i)^2}{2}\cdot 2\left(\frac{H}{\hbar}\right)^2(t-t_0) + \cdots\cdots \qquad (2.1.30)$$

であるから，式（2.1.28）は明らかに微分方程式（2.1.25）を満たす．境界条件も，$t \to t_0$ で（2.1.28）が恒等演算子にもどるので満足されている．（2.1.28）を得るもう一つの方法は，有限の平行移動に対して（1.6.36）を得たのと同様に，無限小の時間的発展の演算子をつぎつぎに合成していくことである．すなわち

$$\lim_{N\to\infty}\left[1-\left(\frac{iH}{\hbar}\right)\frac{(t-t_0)}{N}\right]^N = \exp[-iH\cdot(t-t_0)/\hbar] \tag{2.1.31}$$

となる．

第2の場合．ハミルトン演算子 H は時間に依存するが，異なる時間の H は互いに交換する．例として強さは時間変化するが，方向は時間変化しない磁場中でのスピン磁気モーメントが考えられる．このとき（2.1.25）の形式解は

$$\mathcal{U}(t,\ t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H(t')\right] \tag{2.1.32}$$

となる．これも前と同様に証明できる．（2.1.29）や（2.1.30）の中の $H\cdot(t-t_0)$ を単に $\int_{t_0}^{t} dt' H(t')$ で置き換えればよい．

第3の場合．異なる時間の H が互いに交換しない．引続きスピン磁気モーメントの例でいうと，今度は磁場の方向も時間変化する場合である．$t=t_1$ で x-方向，$t=t_2$ では y-方向といった具合である．S_x と S_y は交換しないので，$\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}$ の形をしている $H(t_1)$ と $H(t_2)$ も交換しない．こういう場合の形式解は

$$\mathcal{U}(t,\ t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots\cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1)H(t_2)\cdots\cdots H(t_n) \tag{2.1.33}$$

で与えられる．この形の摂動展開を場の量子論で発展させたF. J. ダイソンにちなんで，これは**ダイソン級数**といわれることもある．ここでは（2.1.33）の証明を行わない．この証明は相互作用表示での時間的発展の演算子に関して第5章で述べる証明と非常に似たものであるからである．

初歩的な応用では，第1の場合のみに実際上の興味がある．以下この章では H 演算子は時間に依存しないとしよう．時間に依存するハミルトニアンには第5章でお目にかかる．

エネルギー固有ケット

時間的発展の演算子 (2.1.28) が一般の初期ケット$|\alpha\rangle$にどのような影響をおよぼすかを評価するためには，まずこれが$|\alpha\rangle$の展開に用いられた基底ケットへどのような作用をするかを知らなければならない．用いる基底ケットがもしAの固有ケットであり

$$[A,\ H]=0 \tag{2.1.34}$$

なら，特に簡単である．このときAの固有ケットはHの固有ケット，すなわち**エネルギー固有ケット**でもあり，その固有値は$E_{a'}$と記される：

$$H|a'\rangle = E_{a'}|a'\rangle. \tag{2.1.35}$$

いま時間的発展の演算子は$|a'\rangle\langle a'|$によって展開できる．簡単のために$t_0=0$とすると

$$\begin{aligned}\exp[-iHt/\hbar] &= \sum_{a'}\sum_{a''}|a''\rangle\langle a''|\exp(-iHt/\hbar)|a'\rangle\langle a'| \\ &= \sum_{a'}|a'\rangle\exp(-iE_{a'}t/\hbar)\langle a'|\end{aligned} \tag{2.1.36}$$

が得られる．時間的発展の演算子をこの形に表わすと，初期ケットの$\{|a'\rangle\}$による展開が分かれば，どのような初期値問題も解ける．例として初期ケットの展開が

$$|\alpha,\ t_0=0\rangle = \sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle = \sum_{a'}c_{a'}|a'\rangle \tag{2.1.37}$$

であったとすると

$$\begin{aligned}|\alpha,\ t_0=0\,;t\rangle &= \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)|\alpha,\ t_0=0\rangle \\ &= \sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle\exp(-iE_{a'}t/\hbar)\end{aligned} \tag{2.1.38}$$

となる．いいかえれば，時間がたつと展開係数が

$$c_{a'}(t=0) \rightarrow c_{a'}(t) = c_{a'}(t=0)\exp(-iE_{a'}t/\hbar) \qquad (2.1.39)$$

と変化するのである．ここで絶対値は変化しない．各係数の振動数が異なるので，様々な成分間の相対的位相が時間変化することに注意しよう．

初期状態がたまたま $\{|a'\rangle\}$ の一つであるという，興味ある特別な場合を調べよう．はじめは

$$|a',\ t_0=0\rangle = |a'\rangle \qquad (2.1.40)$$

であるが，時間がたつと

$$|a',\ t_0=0;t\rangle = |a'\rangle\exp(-iE_{a'}t/\hbar) \qquad (2.1.41)$$

となる．したがって系がはじめに A と H の同時固有状態にあったとすると，その状態がそのまま保たれる．たかだか起こるのは位相変調 $\exp(-iE_{a'}t/\hbar)$ である．こうした意味で H と両立する観測量［(2.1.34) 参考］は運動の定数といわれる．これに関連したことには，少し形は違うがハイゼンベルクの運動方程式を議論するときに，再び出会うであろう．

ここまでの議論から分かるように量子ダイナミックスの基本的課題は，H と交換する観測量を見出し，その固有値を計算することに帰する．それができればこの観測量の固有ケットで初期ケットを展開し，時間的発展の演算子をかけさえすればよいのである．この最後の手続きでは単に，個々の展開係数の位相が (2.1.39) に示したように変化するだけである．

我々が調べたのは H と交換する演算子が A ただ一つという場合であったが，いくつかの互いに両立する観測量がすべて H と交換する場合

$$\begin{aligned}&[A,\ B]=[B,\ C]=[A,\ C]=\cdots=0,\\&[A,\ H]=[B,\ H]=[C,\ H]=\cdots=0\end{aligned} \qquad (2.1.42)$$

にも容易に一般化できる．1.4節のひとまとめにした指標の記法［(1.4.37)参照］を用いれば

$$\exp(-iHt/\hbar) = \sum_{K'}|K'\rangle\exp(-iE_{K'}t/\hbar)\langle K'| \qquad (2.1.43)$$

と書ける．ここで $E_{K'}$ は a'，b'，c'…… が指定されると一意的にきまる．したがってもっとも大事なことは H とも交換するたがいに両立できる観測量の完全な組を見出すことである．このような1組がわかれば，初期ケットを A，B，C，…と H の同時固有ケットの重ね合せであらわすことができる．最後に(2.1.43)のように表わした時間的発展の演算子をかける．こうして，きわめて一般的な初期値問題を H が時間に依存しないときに解くことができる．

期待値の時間依存性

観測量の期待値が時間の関数としてどう変化するか調べるのは有用である．初期状態が t_0 で（2.1.40）のように，H と交換する観測量 A の一つの固有状態であるとする．ここで他の観測量 B の期待値に着目しよう．B は，A や H と必ずしも交換しない量である．時間がたつと状態ケットは

$$|a',\ t_0=0\,;t\rangle = \mathcal{U}(t,\ 0)|a'\rangle \tag{2.1.44}$$

となるから，$\langle B\rangle$ は

$$\begin{aligned}\langle B\rangle &= (\langle a'|\mathcal{U}^{\dagger}(t,\ 0))\cdot B\cdot(\mathcal{U}(t,\ 0)|a'\rangle)\\ &= \langle a'|\exp\left(\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)B\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right)|a'\rangle\\ &= \langle a'|B|a'\rangle\end{aligned} \tag{2.1.45}$$

で与えられ，t に依存しない．つまりエネルギーの固有状態についてとったある観測量の期待値は，時間変化しない．このためにエネルギー固有状態のことをしばしば**定常状態**という．

さらに興味深いのは，期待値をエネルギー固有状態の重ね合せすなわち**非定常状態**に関してとる場合である．初めに

$$|\alpha,\ t_0=0\rangle = \sum_{a'} c_{a'}|a'\rangle \tag{2.1.46}$$

であったとしよう．B の期待値は容易に計算でき

$$< B > = [\sum_{\alpha} c_{\alpha}{}^{*} < a' | \exp(iE_{\alpha}t/\hbar)] \cdot B \cdot [\sum_{\alpha'} c_{\alpha'} \exp(-iE_{\alpha'}t/\hbar) | a'' >]$$
$$= \sum_{\alpha}\sum_{\alpha'} c_{\alpha}{}^{*} c_{\alpha'} < a' | B | a'' > \exp[-i(E_{\alpha'} - E_{\alpha})t/\hbar)] \qquad (2.1.47)$$

となる．すなわち今度は期待値を構成する各項が振動しており，その角振動数は，N.ボーアの与えた振動数条件

$$\omega_{\alpha'\alpha} = (E_{\alpha'} - E_{\alpha})/\hbar \qquad (2.1.48)$$

で決められている．

スピン歳差運動

ここで例を扱うのが適切であろう．非常に簡単な系を考察するが，この系は今まで発展させた基礎形式をよく説明する．

出発点にとるハミルトニアンは，外部磁場 $\boldsymbol{B}$ 中にある磁気モーメント $e\hbar/2m_{e}c$ を持つ1個のスピン1/2の系を表わす．すなわち

$$H = -\frac{e}{m_{e}c}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} \qquad (2.1.49)$$

で，電子に対しては $e<0$ である．さらに $\boldsymbol{B}$ は z-方向にかかった静的な均一磁場とする．このとき H は

$$H = -\frac{eB}{m_{e}c}S_{z} \qquad (2.1.50)$$

と書ける．S_z と H の違いはかかっている係数だけなので，この二つは明らかに交換する．S_z の固有状態はエネルギーの固有状態でもあり，対応する固有値は

$$E_{\pm} = \mp\frac{e\hbar B}{2m_{e}c}, \qquad (S_{z}\pm \text{ に対して}) \qquad (2.1.51)$$

である．二つのエネルギー固有値の差が $\hbar\omega$ になるように ω を定義するのが

便利であろう．すなわち

$$\omega \equiv \frac{|e|B}{m_e c} \qquad (2.1.52)$$

とする†．すると演算子 H は単に

$$H = \omega S_z \qquad (2.1.53)$$

と書き換えられる．

時間発展のすべての情報は時間的発展の演算子

$$\mathscr{U}(t,\ 0) = \exp(-i\omega S_z t/\hbar) \qquad (2.1.54)$$

に含まれている．これを初期状態にかける．初期ケットを展開するのに用いるべき基底ケットは，当然 S_z の固有ケット $|+>$ および $|->$ であり，これはまた，エネルギー固有ケットでもある．時刻 $t=0$ で系は

$$|\alpha> = c_+|+> + c_-|-> \qquad (2.1.55)$$

と書かれていたとしよう．(2.1.54) をかけると，時間がたったときの状態ケットは

$$|\alpha,\ t_0 = 0\,;t> = c_+\exp(-i\omega t/2)|+> + c_-\exp(+i\omega t/2)|-> \qquad (2.1.56)$$

となることがわかる．ここで

$$H|\pm> = \pm\hbar\omega/2|\pm> \qquad (2.1.57)$$

を用いている．

議論を明確にするために，初期ケット $|\alpha\rangle$ はスピン上向き（正確には S_z+ ）の状態 $|+>$ を表わすことにしよう．つまり

---

† 訳注：この値は荷電粒子のサイクロトロン運動の角振動数と同じである．

$$c_+ = 1, \quad c_- = 0 \tag{2.1.58}$$

とする．時間がたっても，これは（2.1.56）に従って依然スピン上向きの状態にある．定常状態なので当然である．

次に系が初め S_x+ の状態にあったとする．（1.4.17 a ）を（2.1.55）と比較すると

$$c_+ = c_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{2.1.59}$$

であることがわかる．時間が t だけたったのち，系が $S_x\pm$ の状態に見出される確率は容易に計算でき，

$$\begin{aligned}
&|\langle S_x\pm|\alpha,\ t_0=0\,;t\rangle|^2\\
&= \left|\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\langle +|\pm\frac{1}{\sqrt{2}}\langle -|\right]\cdot\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\exp(-i\omega t/2)|+\rangle\right.\right.\\
&\quad\left.\left.+\frac{1}{\sqrt{2}}\exp(+i\omega t/2)|-\rangle\right]\right|^2\\
&= \left|\frac{1}{2}\exp(-i\omega t/2)\pm\frac{1}{2}\exp(i\omega t/2)\right|^2
\end{aligned}$$

$$= \begin{cases} \cos^2\omega t/2, & S_x + \text{に対して} \quad (2.1.60\text{a})\\ \sin^2\omega t/2, & S_x - \text{に対して} \quad (2.1.60\text{b})\end{cases}$$

となる．スピンがはじめ x の正方向を向いていたとしても z-方向の磁場によって回転するのである．その結果，時間がたつと S_x- に状態を見出す確率が有限になる．二つの確率の和は常に1であり，時間的発展の演算子のユニタリー性と合致する．

（1.4.6）を用いて S_x の期待値を

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2}\cos^2(\omega t/2) - \frac{\hbar}{2}\sin^2(\omega t/2) = \frac{\hbar}{2}\cos\omega t \tag{2.1.61}$$

と表わすことができる．したがってこの量は二つのエネルギー固有値の差を

$\hbar$ で割った値の角振動数で振動している．これは一般式（2.1.47）と一致した結果である．同様に S_y，S_z を調べると

$$< S_y > = \frac{\hbar}{2}\sin\omega t \qquad (2.1.62a)$$

$$< S_z > = 0 \qquad (2.1.62b)$$

となる．物理的に述べるとスピンが xy- 平面で歳差運動するのである．スピンの歳差運動については，第 3 章で回転演算子を議論する際に，さらに説明しよう．

相関の強さおよびエネルギー-時間の不確定関係

この節を終るにあたって，異なる時刻の状態ケットに互いにどれだけ相関があるかを調べよう．物理系の $t=0$ での初期状態ケットを $|\alpha>$ とする．それは時間がたつと $|\alpha,\ t_0=0\,;t>$ に変るが，これは時間的発展の演算子をかけることにより求められる．では一体 t だけ時間がたったときの状態ケットは $t=0$ での状態ケットとどれほど似ているだろうか．そこで異なる時刻の二つの状態ケットの内積を作ってみる：

$$C(t) \equiv <\alpha|\alpha,\ t_0=0\,;t> = <\alpha|\mathcal{U}(t,\ 0)|\alpha>. \qquad (2.1.63)$$

これを**相関の強さ**（correlation amplitude）という．$C(t)$ の絶対値は，異なる時刻の状態ケット間の“類似の度合”を定量的に与える．

極端な例として初期ケット $|\ \alpha\ >$ が H の固有ケットであるような特別の場合を考える．そのとき

$$C(t) = <a'|a',t_0=0\,;t> = \exp\left(\frac{-iE_{a}t}{\hbar}\right) \qquad (2.1.64)$$

であり，相関の強さの絶対値はいつも 1 である．定常状態なのでこれは当然である．もっと一般に初期ケットが（2.1.37）のように $\{|a'>\}$ の重ね合せで表

わされる場合には

$$C(t) = (\sum_{\alpha'} c_{\alpha'}^* \langle a'|) \left[\sum_{\alpha''} c_{\alpha''} \exp\left(\frac{-iE_{\alpha''}t}{\hbar}\right) |a''\rangle \right]$$

$$= \sum_{\alpha'} |c_{\alpha'}|^2 \exp\left(\frac{-iE_{\alpha'}t}{\hbar}\right) \qquad (2.1.65)$$

となる．これは異なる振動数で時間的に振動する多くの項の和なので，t が適度に大きくなれば強い打ち消し合いが起こるであろう．$t=0$ で1であった相関の強さは，時間がたつと大きさが減少すると期待される．

(2.1.65) をもっと具体的な方法で評価したい．この状態ケットが同じようなエネルギーを持つ非常に多くのエネルギー固有ケットの重ね合せになっていて，エネルギーは実質的に準連続的スペクトルを持つとみなせるとしよう．そのとき，和を

$$\sum_{\alpha'} \to \int dE\, \rho(E)\ , \qquad c_{\alpha'} \to g(E)\Big|_{E \simeq E_{\alpha'}} \qquad (2.1.66)$$

のように積分で置き換えることが許される．ここで $\rho(E)$ はエネルギー固有状態の密度である．すると (2.1.65) の表式は

$$C(t) = \int dE |g(E)|^2 \rho(E) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) \qquad (2.1.67)$$

となる．これには，規格化条件

$$\int dE |g(E)|^2 \rho(E) = 1 \qquad (2.1.68)$$

がついている．現実の物理的状況では $|g(E)|^2\rho(E)$ が $E=E_0$ のまわりで幅 ΔE のピークを持っているとしてよい．(2.1.67) を

$$C(t) = \exp\left(\frac{-iE_0t}{\hbar}\right) \int dE |g(E)|^2 \rho(E) \exp\left[\frac{-i(E-E_0)t}{\hbar}\right] \qquad (2.1.69)$$

と表わせば分かるように，t が大きくなるとエネルギー間隔 $|E-E_0|$ が $\hbar/t$

にくらべて小さくない限り被積分関数は非常に速く振動する．もしも$|E - E_0| \simeq \hbar / t$が成り立つ間隔が$|g(E)|^2\rho(E)$の幅$\Delta E$よりずっと狭ければ，強く打ち消し合うために$C(t)$への寄与は実質的に無くなってしまう．相関の強さの絶対値が1からかなりずれてくる特性時間は

$$t \simeq \frac{\hbar}{\Delta E} \tag{2.1.70}$$

で与えられる．この式は準連続エネルギースペクトルを持つ重ね合わせの状態に対して得られたものであるが，2準位系に対しても意味を持つ．前に考察したスピンの歳差運動の問題では，初め$|S_x+\rangle$であった状態ケットは（2.1.60）から明らかなようにほぼ$1/\omega = \hbar/(E_+ - E_-)$だけ時間がたつともとの自分の形を失いはじめる．

要約すると，時間的発展の結果，物理系の状態ケットはほぼ$\hbar/\Delta E$の時間間隔だけしか原形を保つことができないのである．この特徴は時間とエネルギーの不確定関係

$$\Delta t \Delta E \simeq \hbar \tag{2.1.71}$$

の説明によく用いられている．ただしここで，この時間とエネルギーの不確定関係は，1.4節で議論した二つの両立できない観測量の間の不確定関係とは非常に違った性質のものだということを，はっきりと理解しておきたい．第5章で時間を含む摂動論と関連させて再び（2.1.71）を考えよう．

2.2 シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示

ユニタリー演算子

前節で時間発展の概念を導入した際に，状態ケットにかかる時間的発展の演算子を考えた．量子ダイナミックスへのこのようなアプローチを**シュレーディンガー表示**という．量子ダイナミックスのもう一つの定式化では，状

態ケットではなく観測量が時間変化する．この2番目のアプローチは**ハイゼンベルク表示**と呼ばれている．この二つのアプローチの差を詳細に議論する前に，脇道にそれてユニタリー演算子に関して一般的なことを少し述べておこう．

ユニタリー演算子は量子力学で様々な目的で使われる．本書ではユニタリー性を満たす演算子がまず1.5節で登場した．その節で問題にしたのは，一つの表示での基底ケットが他の表示での基底ケットとどう関連するかであった．状態ケットそのものは，基底ケットの組を変えても変化しないと仮定されている．もちろん $|\alpha\rangle$ の展開係数の数値は表示が違えば異なる．続いて実際に状態ケットを変えるユニタリー演算子を二つ導入した．1.6節の平行移動演算子と2.1節の時間的発展の演算子である．すなわち

$$|\alpha\rangle \to U|\alpha\rangle \tag{2.2.1}$$

において U は $\mathscr{T}(d\boldsymbol{x})$ あるいは $\mathscr{U}(t,\ t_0)$ を表わす．ここで $U|\alpha\rangle$ は実際に平行移動した後の，あるいは時間発展した後の物理系に対応する状態ケットである．

状態ブラと状態ケットの内積は，状態ケットを変えるユニタリー変換のもとで，不変であることを心に留めておくべきである：

$$\langle\beta|\alpha\rangle \to \langle\beta|U^{\dagger}U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle. \tag{2.2.2}$$

これらの変換が演算子にではなく，状態ケットに作用することを用いて，$\langle\beta|X|\alpha\rangle$ がどう変化しなければならないかが推測できる：

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle \to (\langle\beta|U^{\dagger})\cdot X\cdot(U|\alpha\rangle) = \langle\beta|U^{\dagger}XU|\alpha\rangle. \tag{2.2.3}$$

ここで積の結合則から導かれる，非常に簡単な数学的注意をしておこう：

$$(\langle\beta|U^{\dagger})\cdot X\cdot(U|\alpha\rangle) = \langle\beta|\cdot(U^{\dagger}XU)\cdot|\alpha\rangle. \tag{2.2.4}$$

この式の中に何か“物理”があるだろうか．この数学の恒等式は，ユニタリー

変換に二つのアプローチがあることを示している：

第1のアプローチ：

$$|\alpha\rangle \to U|\alpha\rangle,\ \text{ただし演算子は不変,} \tag{2.2.5a}$$

第2のアプローチ：

$$X \to U^{\dagger}XU,\ \text{ただし状態ケットは不変.} \tag{2.2.5b}$$

古典物理では状態ケットを導入しないで，平行移動とか時間発展などを問題にする．そうできるのは，こうした操作が実際に古典力学の観測量である $\boldsymbol{x}$ とか $\boldsymbol{L}$ とかの値を変化させるからである．したがって第2のアプローチをとれば古典力学との密接な関連が確立されるのでないかと推測できる．

ここで簡単な例が助けになるだろう．再び無限小平行移動の演算子 $\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')$ に戻ろう．1.6節で与えた定式化は第1のアプローチに基づく．$\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}')$ は状態ケットにかかり，位置の演算子にかかるのではないので

$$|\alpha\rangle \to (1-i\boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{x}'/\hbar)|\alpha\rangle,$$

$$\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x} \tag{2.2.6}$$

となる．これと対照的に，第2のアプローチをとるならば

$$|\alpha\rangle \to |\alpha\rangle,$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x} \to \left(1+\frac{i\boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{x}'}{\hbar}\right)\boldsymbol{x}\left(1-\frac{i\boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{x}'}{\hbar}\right) &= \boldsymbol{x}+\left(\frac{i}{\hbar}\right)[\boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{x}',\ \boldsymbol{x}] \\ &= \boldsymbol{x}+d\boldsymbol{x}\end{aligned} \tag{2.2.7}$$

が得られる．どちらのアプローチをとっても $\boldsymbol{x}$ の期待値に関しては同じ結論

$$\langle\, \boldsymbol{x}\,\rangle \to \langle\, \boldsymbol{x}\,\rangle + \langle\, d\boldsymbol{x}\,\rangle \tag{2.2.8}$$

が導けることを，読者の演習問題として残しておく．

シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示における状態ケットと観測量

時間的発展の演算子 $\mathcal{U}(t, t_0)$ にもどろう．前節では状態ケットが時間とともにどう発展していくかを調べた．すなわち時間発展に関して第1のアプローチをとった．これは**シュレーディンガー表示**と呼ばれる．同様に時間発展に関して**ハイゼンベルク表示**と呼ばれる第2のアプローチをとることもできる．

シュレーディンガー表示では前節で示したように，x，p_y，S_z といった観測量に対応する演算子は時間がたっても変化せず，状態ケットが変化する．ところがハイゼンベルク表示では時間変化するのは観測量に対応する演算子であり，状態ケットの方は時刻 t_0 での値にいわば凍りついていて動かない．$\mathcal{U}(t, t_0)$ の中の t_0 は簡単のためにゼロと置き，次のように定義した $\mathcal{U}(t)$ を用いるのが便利であろう：

$$\mathcal{U}(t, t_0 = 0) \equiv \mathcal{U}(t) = \exp(-iHt/\hbar). \tag{2.2.9}$$

第2のアプローチ（2.2.5b）に従って，ハイゼンベルク表示の観測量を

$$A^{(H)}(t) \equiv \mathcal{U}^\dagger(t) A^{(S)} \mathcal{U}(t) \tag{2.2.10}$$

で定義する．ここで添字の H と S は，それぞれハイゼンベルクないしシュレーディンガーをあらわす．ハイゼンベルク表示の観測量とシュレーディンガー表示の観測量とは $t = 0$ で一致する：

$$A^{(H)}(0) = A^{(S)}. \tag{2.2.11}$$

状態ケットの二つの表示も $t = 0$ で一致する．時間が t だけたっても，ハイゼンベルク表示の状態ケットは $t = 0$ でのものと同じであり

$$|\alpha,\ t_0 = 0; t\rangle_H = |\alpha,\ t_0 = 0\rangle, \tag{2.2.12}$$

t に依存しない．これはシュレーディンガー表示の状態ケットとは著しく異

なっている：

$$|\alpha,\ t_0=0\,;t\rangle_S=\mathcal{U}(t)|\alpha,\ t_0=0\rangle. \tag{2.2.13}$$

期待値$\langle A\rangle$はどちらの表示でも明らかに同じになる：

$$\begin{aligned}{}_S\langle\alpha,t_0=0\,;t|A^{(S)}|\alpha,\ t_0=0\,;t\rangle_S&=\langle\alpha,t_0=0|\mathcal{U}^\dagger A^{(S)}\mathcal{U}|\alpha,t_0=0\rangle\\&={}_H\langle\alpha,\ t_0=0\,;\,t|A^{(H)}(t)|\alpha,t_0=0\,;t\rangle_H.\end{aligned} \tag{2.2.14}$$

ハイゼンベルクの運動方程式

ここで，ハイゼンベルク表示で基礎になる運動方程式を導こう．$A^{(S)}$はあからさまに時間に依存しないと仮定する．物理的に興味のあるたいていの場合はこうなっている．この場合，(2.2.10) を微分することによって

$$\begin{aligned}\frac{dA^{(H)}}{dt}&=\frac{\partial\mathcal{U}^\dagger}{\partial t}A^{(S)}\mathcal{U}+\mathcal{U}^\dagger A^{(S)}\frac{\partial\mathcal{U}}{\partial t}\\&=-\frac{1}{i\hbar}\mathcal{U}^\dagger H\mathcal{U}\mathcal{U}^\dagger A^{(S)}\mathcal{U}+\frac{1}{i\hbar}\mathcal{U}^\dagger A^{(S)}\mathcal{U}\mathcal{U}^\dagger H\mathcal{U}\\&=\frac{1}{i\hbar}[A^{(H)},\ \mathcal{U}^\dagger H\mathcal{U}]\end{aligned} \tag{2.2.15}$$

が得られる．ここで

$$\frac{\partial\mathcal{U}}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}H\mathcal{U} \tag{2.2.16a}$$

$$\frac{\partial\mathcal{U}^\dagger}{\partial t}=-\frac{1}{i\hbar}\mathcal{U}^\dagger H \tag{2.2.16b}$$

を用いた [(2.1.25) 参照]. H はもともとシュレーディンガー表示で導入したので (2.2.10) にあうように

$$H^{(H)}=\mathcal{U}^\dagger H\mathcal{U} \tag{2.2.17}$$

と定義したくなるかも知れない．しかし，$\mathscr{U}$ は (2.2.9) で与えられているので明らかに，$\mathscr{U}$ と H は交換する．この結果

$$\mathscr{U}^{\dagger} H \mathscr{U} = H \tag{2.2.18}$$

が得られる．したがって (2.2.15) を

$$\frac{dA^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}, H] \tag{2.2.19}$$

と書いて全く差しつかえない．この方程式は**ハイゼンベルクの運動方程式**と呼ばれている．これを導くのに使ったのは時間的発展の演算子の性質と，$A^{(H)}$ の定義式であったことに注意しよう．

(2.2.19)式を，ポアソンのかっこ形式に書いた古典論の運動方程式と比較するのは，教訓的である．古典物理学では，q および p の関数である A が時間をあからさまに含まないとき

$$\frac{dA}{dt} = [A, H]_{\text{古典的}} \tag{2.2.20}$$

である (Goldstein 1980, pp.405-6)．ここでもディラックの量子化の規則 (1.6.47)が量子力学の正しい方程式を導いていることがわかる．実際，歴史的には (2.2.19) を初めて書いたのはP. A. M. ディラックであったが，つつましい性格の彼はそれをハイゼンベルクの運動方程式と呼んだのである．しかしここで，(2.2.19)は古典論で $A^{(H)}$ に類似な量があるかないかに拘らず意味を持つことを注意したい．例えば，ハイゼンベルク表示でスピン演算子は

$$\frac{dS_i^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[S_i^{(H)}, H] \tag{2.2.21}$$

を満たす．これはスピンの歳差運動を議論するとき使われるが，S_z や H は q や p の関数として表すことができないので，この方程式には古典論で対応するものがない．古典的対照がある量については，ディラックの規則 (1.6.47)

とは逆に，対応する量子力学の方程式から正しい古典論の方程式が

$$[\ \ ,\ \ ]/i\hbar \to [\ \ ,\ \ ]_{古典的} \qquad (2.2.22)$$

の仮定を用いて得られるといえる．古典力学は量子力学から導けるがその逆はできない*

自由粒子，エーレンフェストの定理

シュレーディンガー表示にせよハイゼンベルク表示にせよ運動方程式を用いるためには，まず適切なハミルトン演算子を構成する方法を知らなければならない．古典的対応のある物理系では，ハミルトニアンを古典物理と同じ形に仮定する．そして単に古典論の x_i や p_i を量子力学で対応する演算子に置き換える．こう仮定しておけば正しい古典論の方程式が古典的極限で再現できる．交換しない観測量のためにあいまいさが生じたら，いつも H がエルミート的になるようにして解決する．例えば古典論での積 xp を量子論で書くには $\frac{1}{2}(xp+px)$ とすればよい．問題にしている物理系に古典的に対応するものがないとき，ハミルトン演算子の構造を決めるのは推量によるほかない．いろいろな形のものを試みて，実験の観測に合う結果が導けるハミルトニアンを見出すのである．

実際に応用するにあたって，x_i（または p_i）と x_j や p_j の関数との交換子を計算する必要がしばしばある．このために次の式が役に立つ：

$$[x_i,\ F(\boldsymbol{p})] = i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_i} \qquad (2.2.23a)$$

および

$$[p_i,\ G(\boldsymbol{x})] = -i\hbar\frac{\partial G}{\partial x_i}. \qquad (2.2.23b)$$

---

* この本では，シュレーディンガー表示 → ハイゼンベルク表示 → 古典論の順序をとった．同じ問題を逆の順序，古典論 → ハイゼンベルク表示 → シュレーディンガー表示で明らかにする取扱いに関しては，Finkelstein（1973），pp.68-70，p.109を見よ．

ここで F および G は x_j と p_j の級数に展開できる関数である．両式とも（1.6.50e）をくりかえし適用することにより容易に証明できる．

ここで，ハイゼンベルクの運動方程式を質量 m の自由粒子に対して適応してみよう．ハミルトニアンは古典力学と同じ形にとることにする：

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} = \frac{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)}{2m}. \tag{2.2.24}$$

観測量 p_i と x_i に注目する．これらは添字（H）は省いているがハイゼンベルク表示の運動量および位置の演算子である．p_i は p_j の任意の関数と交換するので

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\, p_i,\ H\,] = 0 \tag{2.2.25}$$

が得られる．したがって自由粒子では，運動量演算子は運動の定数である．すなわち $p_i(t)$ は常に $p_i(0)$ と同じである．一般にハイゼンベルクの運動方程式(2.2.19)から明らかなように，$A^{(H)}$ がハミルトニアンと交換するときはいつも $A^{(H)}$ は運動の定数である．次に（2.2.23a）を利用すると

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[\, x_i,\ H\,] = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m}\, i\hbar\, \frac{\partial}{\partial p_i}\left(\sum_{j=1}^{3} p_j{}^2\right) \\ &= \frac{p_i}{m} = \frac{p_i(0)}{m} \end{aligned} \tag{2.2.26}$$

となる．つまり解として

$$x_i(t) = x_i(0) + (p_i(0)/m)t, \tag{2.2.27}$$

が得られるが，この解は一様な直線運動の古典的軌跡の方程式を思わせる．重要なことは，たとえ同時刻で

$$[\, x_i(0),\ x_j(0)\,] = 0 \tag{2.2.28}$$

であったとしても異なる時刻での x_i 同志の交換子はゼロにならないことである．すなわち

$$[x_i(t),\ x_i(0)] = [p_i(0)t/m,\ x_i(0)] = -i\hbar t/m \qquad (2.2.29)$$

である．不確定関係（1.4.53）をこの交換子に適用すると

$$\langle (\Delta x_i)^2 \rangle_t \langle (\Delta x_i)^2 \rangle_{t=0} \geq \hbar^2 t^2/4m^2 \qquad (2.2.30)$$

が得られる．この関係式は，なによりもまず，粒子がたとえ $t=0$ で十分に局在していても，その位置は時間と共にますます不確定になることを示している．この結論は波動力学で自由粒子の波束の時間発展の様子を調べることによっても同様に得られる．

さて今の自由粒子のハミルトニアンにポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ をつけ加えよう：

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{x}). \qquad (2.2.31)$$

ここで $V(\boldsymbol{x})$ は演算子 x，y，および z の関数と考える．今度は（2.2.23b）を用いて

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i,\ V(\boldsymbol{x})] = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(\boldsymbol{x}) \qquad (2.2.32)$$

が得られる．一方

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{p_i}{m} \qquad (2.2.33)$$

は依然成り立っている．新たにつけ加えた項 $V(\boldsymbol{x})$ と x_i は交換するからである．もう一度ハイゼンベルクの運動方程式を用いると

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{dx_i}{dt},\ H\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{p_i}{m},\ H\right] = \frac{1}{m}\frac{dp_i}{dt} \qquad (2.2.34)$$

が導ける．これを（2.2.32）と一緒にすれば，結局ベクトルの形で

$$m\frac{d^2\boldsymbol{x}}{dt^2} = -\nabla V(\boldsymbol{x}) \tag{2.2.35}$$

が得られる．これは量子力学におけるニュートンの第2法則である．両辺の期待値を，時間がたっても変らないハイゼンベルクの状態ケットに関して取ると

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\boldsymbol{x}\rangle = \frac{d\langle\boldsymbol{p}\rangle}{dt} = -\langle\nabla V(\boldsymbol{x})\rangle \tag{2.2.36}$$

が得られる．これは波動力学を用いて1927年にP. エーレンフェストが導いた式であり，**エーレンフェストの定理**として知られている．こうして期待値の形に書けば，ハイゼンベルク表示を使おうがシュレーディンガー表示であろうが，この式の有効性に変わりがない．結局，二つの表示で期待値は同じである．ところが演算子の式（2.2.35）が意味のあるのは，$\boldsymbol{x}$や$\boldsymbol{p}$をハイゼンベルク表示の演算子とするときのみである．

（2.2.36）からは$\hbar$がすっかり消えていることに注目しよう．したがって波束の中心は$V(\boldsymbol{x})$の下で当然，古典的粒子のように運動する．

基底ケットと遷移振幅

今迄，基底ケットがどのように時間変化するのかを問題にしなかった．よくおきる思い違いは，シュレーディンガー表示ではすべてのケットが時間と共に変化し，ハイゼンベルク表示では定常的であるという誤解である．すぐ明らかになるが，そうではない．状態ケットと基底ケットの振舞の違いを区別することが重要である．

1.2節でケット空間を議論したとき，初めに観測量の固有ケットが基底ケットとして使えることを注意した．では固有値方程式

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \tag{2.2.37}$$

は時間と共にどうなるであろう．シュレーディンガー表示では A は変化しないので，例えば $t=0$ でこの固有値方程式の解として得られる基底ケットも不変でなければならない．状態ケットとは違って基底ケットはシュレーディンガー表示で変らないのである．

ハイゼンベルク表示では全く事情が違って，調べる固有値方程式は時間に依存する演算子

$$A^{(H)}(t)=\mathcal{U}^{\dagger}A(0)\mathcal{U} \tag{2.2.38}$$

に対するものとなる．2つの表示が一致する $t=0$ で（2.2.37）を用いれば

$$\mathcal{U}^{\dagger}A(0)\mathcal{U}\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle = a'\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle \tag{2.2.39}$$

であるが，これは $A^{(H)}$ に対する固有値方程式

$$A^{(H)}(\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle)=a'(\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle) \tag{2.2.40}$$

を意味している．観測量の固有ケットが基底ケットをつくるという見方をとり続けると，ハイゼンベルク表示での基底ケットとして $\{\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle\}$ を用いなければならない．時間がたつと共に，$|a',t\rangle_H$ で表わすハイゼンベルク表示の基底ケットは

$$|a',t\rangle_H=\mathcal{U}^{\dagger}|a'\rangle \tag{2.2.41}$$

に従って変化していく．(2.2.41) に $\mathcal{U}$ でなくて $\mathcal{U}^{\dagger}$ があらわれているので，ハイゼンベルク表示の基底ケットは，シュレーディンガー表示の状態ケットに比較して“逆回転している”といえよう．特に $|a',t\rangle_H$ は“符号の異なるシュレーディンガー方程式”

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|a',t\rangle_H=-H|a',\ t\rangle_H \tag{2.2.42}$$

を満たす．

固有値そのものは，(2.2.40) から分かるように時間変化しない．これは，1.5節で述べたユニタリー不変な観測量についての定理に合致している．$A^{(H)}(t)$ をハイゼンベルク表示の基底ケットとブラで次のように展開してみると

$$A^{(H)}(t) = \sum_{a'} |a', \quad t>_H a'_H<a', \quad t| = \sum_{a'} \mathcal{U}^\dagger |a'>a'<a'| \mathcal{U}$$

$$= \mathcal{U}^\dagger A^{(S)} \mathcal{U} \qquad (2.2.43)$$

となることにも注意しよう．ハイゼンベルクの基底ケットが (2.2.41) のように変化するとすれば，すべてがよく合致する．

状態ケットを基底ケットで展開するときの係数は，二つの表示で同一であることが分かる．すなわち

$$c_\alpha(t) = \underbrace{<a'|}_{\text{基底ブラ}} \cdot \underbrace{(\mathcal{U}|\alpha, \quad t_0 = 0>)}_{\text{状態ケット}}, \text{（シュレーディンガー表示）} \qquad (2.2.44\text{a})$$

$$c_\alpha(t) = \underbrace{(<a'|\mathcal{U})}_{\text{基底ブラ}} \cdot \underbrace{|\alpha, \quad t_0 = 0>}_{\text{状態ケット}}, \text{（ハイゼンベルク表示）} \qquad (2.2.44\text{b})$$

となる．模式図的にいうならば状態ケットと基底ケットのなす角の“コサイン”は状態ケットを反時計廻りに回しても，基底ケットを時計廻りに回しても同じなのである．この考えは基底ケットが連続スペクトルを持つときも同様に適用できる．特に波動関数 $<x|\alpha>$ は，(i) 定常的な位置の固有ブラと，運動している状態ケットとの内積とみなす（シュレーディンガー表示）こともできるし，(ii) 運動している位置の固有ブラと，定常的な状態ケットとの内積とみなす（ハイゼンベルク表示）こともできる．2.4節で波動関数の時間依存性を議論するが，そこで有名なシュレーディンガーの波動方程式を導くことにしよう．

二つの表示の同等性をさらに説明するために，2.5節で重要な役割を果す**遷移振幅**を調べる．ある物理系が $t=0$ で，観測量 A の固有値 a' の固有

状態にあったとしよう．その後，時刻 t で，系が観測量 B の固有値 b' の固有状態にある確率振幅はいくらだろうか．これが遷移振幅と呼ばれる量である．ここで A と B とは同じであっても違っていてもよい．シュレーディンガー表示では t での状態ケットは $\mathcal{U}|a'\rangle$ で与えられるが，基底ケットの $|a'\rangle$ や $|b'\rangle$ は時間変化しない．したがってこの遷移振幅は

$$\underbrace{\langle b'|}_{\text{基底ブラ}}\cdot\underbrace{(\mathcal{U}|a'\rangle)}_{\text{状態ケット}} \tag{2.2.45}$$

となる．これに対してハイゼンベルク表示では状態ケットは定常的で，ずっと $|a'\rangle$ の状態にあるが，基底ケットが逆方向に時間変化する．したがって遷移振幅は

$$\underbrace{(\langle b'|\mathcal{U})}_{\text{基底ブラ}}\cdot\underbrace{|a'\rangle}_{\text{状態ケット}} \tag{2.2.46}$$

となる．明らかに（2.2.45）と（2.2.46）は同一であり，二つとも

$$\langle b'|\mathcal{U}(t,0)|a'\rangle \tag{2.2.47}$$

と書ける．おおまかにいうとこれは状態 $|a'\rangle$ から状態 $|b'\rangle$ へ“移行する”遷移振幅である．

表2.1. シュレーディンガー表示 と ハイゼンベルク表示の比較

	シュレーディンガー表示	ハイゼンベルク表示
状態ケット	変化する：(2.1.5),(2.1.27)	定常的
観　測　量	定常的	変化する：(2.2.10),(2.2.19)
基底ケット	定常的	“逆向きに”変化する．(2.2.41),(2.2.42)

この節の終りに，シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示の差異をまとめて表にしておく．表2.1を参照せよ．

2.3 調和振動子

調和振動子は量子力学の最も重要な課題の一つである．教育的見地から，それは量子力学の基礎概念や手法を説明するのに用いられる．実用的見地からみれば現代物理の様々な分野——分子分光，固体物理，核構造，場の量子論，量子光学，量子統計力学など——で応用されている．歴史的にみれば，M. プランクが輻射の振動子に不連続なエネルギー単位を割り当てたことから量子論の誕生が促された．量子力学的振動子の性質を完全に理解することは，現代物理学を学ぶまじめな学生に不可欠である．

エネルギー固有ケットとエネルギー固有値

ディラックによるエレガントな演算子法から話を始めよう．これは，その前になされた M. ボルンと N. ウィーナーの仕事に基づくもので，調和振動子のエネルギー固有ケットと固有値が得られる．基礎になるハミルトニアンは

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2} \tag{2.3.1}$$

であり，ω は古典的振動子の角振動数でフックの法則のばね定数 k と $\omega=\sqrt{k/m}$ の関係がある．演算子 x および p はいうまでもなくエルミート的である．ここで，それぞれ**消滅演算子**，**生成演算子**と呼ばれる二つの非エルミート演算子

$$a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{ip}{m\omega}\right),\qquad a^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x-\frac{ip}{m\omega}\right) \tag{2.3.2}$$

を定義すると便利である．その理由はじきに明らかになる．正準交換関係を用いると，容易に

$$[a,\ a^\dagger]=\frac{1}{2\hbar}(-i[x,\ p]+i[p,\ x])=1 \tag{2.3.3}$$

が得られる．さらに個数演算子

$$N = a^{\dagger} a \tag{2.3.4}$$

も定義しよう．これは明らかにエルミート的である．これらより直ちに

$$a^{\dagger} a = \frac{m\omega}{2\hbar}\left(x^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2}\right) + \frac{i}{2\hbar}[\,x,\ p\,]$$

$$= \frac{H}{\hbar\,\omega} - \frac{1}{2} \tag{2.3.5}$$

が示される．これから，個数演算子とハミルトン演算子の間の重要な関係式が得られる：

$$H = \hbar\,\omega\left(N + \frac{1}{2}\right). \tag{2.3.6}$$

H は N の 1 次関数だから，N は H と同時に対角化できる．N のエネルギー固有ケットを固有値 n で記すと

$$N|n> = n|n> \tag{2.3.7}$$

となる．n が負でない整数でなければならないことを後に示す．また (2.3.6) より

$$H|n> = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega|n> \tag{2.3.8}$$

が得られる．これはエネルギー固有値が

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega \tag{2.3.9}$$

で与えられることを示している．

a，$a^{\dagger}$ および N の物理的意味を吟味するために，まず，(2.3.3) を

用いると

$$[N,\ a]=[a^\dagger a,\ a]=a^\dagger[a,\ a]+[a^\dagger,\ a]a=-a \tag{2.3.10}$$

が成り立つことに注目する．同様に

$$[N,\ a^\dagger]=a^\dagger \tag{2.3.11}$$

が導ける．その結果，

$$Na^\dagger|n>=([N,\ a^\dagger]+a^\dagger N)|n>=(n+1)a^\dagger|n> \tag{2.3.12a}$$

および

$$Na|n>=([N,\ a]+aN)|n>=(n-1)a|n> \tag{2.3.12b}$$

が得られる．これらの関係式は $a^\dagger|n>$ ($a|n>$) が，固有値を1だけ増加（減少）させた N の固有ケットであることを意味している．n が1だけ増加（減少）することは，エネルギー $\hbar\omega$ の1量子単位が創られる（消される）ことになるので，$a^\dagger(a)$ に生成演算子（消滅演算子）という用語をあてるのは適当と思われる．

等式（2.3.12b）は $a|n>$ と $|n-1>$ とが定数を別にすれば同じであることを暗示している．そこで

$$a|n>=c|n-1> \tag{2.3.13}$$

と書き，数定数 c を $|n>$ も $|n-1>$ も規格化されるという要請から決めることにする．はじめに

$$<n|a^\dagger a|n>=|c|^2 \tag{2.3.14}$$

に注意しよう．（2.3.14）の左辺は，$a^\dagger a$ がちょうど個数演算子であることに注意すると計算でき

$$n=|c|^2 \tag{2.3.15}$$

が得られる．いつも行うように c を正の実数にとると，最終的に

$$a|n> = \sqrt{n}\,|n-1> \tag{2.3.16}$$

が得られる．同様に

$$a^{\dagger}|n> = \sqrt{n+1}\,|n+1> \tag{2.3.17}$$

が容易に示せる．

（2.3.16）の両辺に次々と消滅演算子をかけていくと

$$a^2|n> = \sqrt{n(n-1)}\,|n-2>$$

$$a^3|n> = \sqrt{n(n-1)(n-2)}\,|n-3> \tag{2.3.18}$$

$$\vdots$$

となる．個数演算子の固有ケットとしてだんだんに小さな n を持つものが，系列が終るまで得られる．正整数 n から始める限り，系列に終りは必ずくる．仮に整数でない n から出発すれば，系列に終点がなく負の値の n を持つ固有ケットが得られてくると主張できるかも知れない．しかし $a|n>$ のノルムが正でなければならないという要請

$$n = <n|N|n> = (<n|a^{\dagger})\cdot(a|n>) \geq 0 \tag{2.3.19}$$

も存在し，これは n が決して負にならないことを意味している！　しがって，この系列は $n=0$ で終り，許される n の値は負でない整数と結論できる．

可能な n の最小値はゼロであるから，調和振動子の基底状態は

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\,\omega \tag{2.3.20}$$

を持つ．ここで基底状態 $|0>$ に，次々と生成演算子 $a^{\dagger}$ をかけることができる．（2.3.17）を用いて

$$|1> = a^{\dagger}|0>,$$

$$|2\rangle = \left(\frac{a^\dagger}{\sqrt{2}}\right)|1\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^2}{\sqrt{2}}\right]|0\rangle,$$

$$|3\rangle = \left(\frac{a^\dagger}{\sqrt{3}}\right)|2\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^3}{\sqrt{3\,!}}\right]|0\rangle,$$

$$\vdots$$

$$|n\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n\,!}}\right]|0\rangle \tag{2.3.21}$$

が得られる．このようにしてエネルギー固有値

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\,\omega,\ (n=0,1,2,3\cdots\cdots) \tag{2.3.22}$$

を持つ N と H との同時固有ケットを作り上げることに成功した．

(2.3.16)，(2.3.17) および $\{|n\rangle\}$ に関する規格直交条件より，行列要素

$$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}, \qquad \langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} \tag{2.3.23}$$

が得られる．これらを

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^\dagger), \qquad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-a+a^\dagger) \tag{2.3.24}$$

と一緒に用いて，x および p の演算子の行列要素

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right) \tag{2.3.25a}$$

$$\langle n'|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(-\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right) \tag{2.3.25b}$$

が導ける．ここで用いている N 表示では，x も p も対角型になっていないこ

とに注意しよう．a や $a^\dagger$ と同じように x と p は，N と交換しないのであるからこれは当然である．

演算子法は，位置空間でのエネルギー固有関数を得るためにも用いられる．等式

$$a|0\rangle = 0 \tag{2.3.26}$$

で定義される基底状態$|0\rangle$ からはじめよう．x-表示でこれは

$$\langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x'|x + \frac{ip}{m\omega}|0\rangle = 0 \tag{2.3.27}$$

である．(1.7.17) を思い出すと，上式を基底状態の波動関数 $\langle x'|0\rangle$ に対する微分方程式

$$\left(x' + x_0{}^2\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle = 0 \tag{2.3.28}$$

と見なせる．ここで振動子の長さのスケールを決める

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{2.3.29}$$

を導入した．(2.3.28) の規格化された解は

$$\langle x'|0\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\right)\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right] \tag{2.3.30}$$

であることが分かる．励起状態のエネルギー固有関数も，また次式を計算して求められる．

$$\begin{aligned}\langle x'|1\rangle &= \langle x'|a^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}x_0}\left(x' - x_0{}^2\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle,\\ \langle x'|2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle x'|(a^\dagger)^2|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\right)^2\left(x' - x_0{}^2\frac{d}{dx'}\right)^2\langle x'|0\rangle,\ \cdots\end{aligned} \tag{2.3.31}$$

一般には

$$<x'|n> = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n\,!}}\right)\left(\frac{1}{x_0^{n+1/2}}\right)\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)^n \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right] \tag{2.3.32}$$

が得られる．

基底状態での x^2 と p^2 の期待値を調べるのは有益である．まず

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^2 + a^{\dagger 2} + a^\dagger a + aa^\dagger) \tag{2.3.33}$$

に着目する．x^2の期待値を取るとき，ゼロでない寄与をするのは，(2.3.33)の最後の項だけで

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{x_0^2}{2} \tag{2.3.34}$$

となる．同様に

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \tag{2.3.35}$$

である．したがって運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの期待値はそれぞれ

$$\left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{<H>}{2} \quad \text{および} \quad \left\langle\frac{m\omega^2 x^2}{2}\right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{<H>}{2} \tag{2.3.36}$$

となり，ビリアル定理から期待される通りである．(2.3.25a) と (2.3.25b) から

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0 \tag{2.3.37}$$

となるが，これは励起状態に対しても成り立つ．以上により

$$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad \text{および} \quad \left\langle (\Delta p)^2 \right\rangle = \left\langle p^2 \right\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \tag{2.3.38}$$

が得られ，不確定関係が不確定さの積を最小にする形

$$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta p)^2 \right\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \tag{2.3.39}$$

で満足されていることが分かる．これは基底状態の波動関数がガウス型であることを考えると，驚くことでない．これに対し，励起状態での不確定さの積は，もっと大きく

$$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta p)^2 \right\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2 \tag{2.3.40}$$

となる．読者はこの結果を容易に確かめられるであろう．

振動子の時間的発展

今までは振動子の状態ケットの時間的発展や x および p といった観測量の時間的発展について，議論をしなかった．すべての計算式はある瞬間の時刻，例えば $t=0$ において成り立つと仮定している．つまり，演算子 x，p，a および $a^\dagger$ は（すべての時刻 t での）シュレーディンガー表示の演算子か，$t=0$ でのハイゼンベルク表示の演算子のどちらかであると見なしてきた．この節の残りではもっぱらハイゼンベルク表示を用いる．すなわち，x，p，a および $a^\dagger$ はわざわざ $x^{(H)}(t)$ などと書かないが，すべて時間依存性を持つ．

ハイゼンベルクの運動方程式は p と x に対して，(2.2.32) と (2.2.33) より

$$\frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x, \tag{2.3.41a}$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \tag{2.3.41b}$$

と書ける．この一対の連立微分方程式は，a と $a^\dagger$ に対する二つの分離した微分方程式と同値である．すなわち

$$\frac{da}{dt}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\frac{p}{m}-i\omega x\right)=-i\omega a \tag{2.3.42a}$$

および

$$\frac{da^\dagger}{dt}=i\omega a^\dagger \tag{2.3.42b}$$

であり，その解は

$$a(t)=a(0)\exp(-i\omega t)\quad \text{および}\quad a^\dagger(t)=a^\dagger(0)\exp(i\omega t) \tag{2.3.43}$$

となる．ちなみにこれらの関係式は，N と H がハイゼンベルク表示であっても当然時間に依存しない演算子であることを明示している．x と p を使って（2.3.43）は

$$\begin{aligned} x(t)+\frac{ip(t)}{m\omega}&=x(0)\exp(-i\omega t)+i\left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\exp(-i\omega t),\\ x(t)-\frac{ip(t)}{m\omega}&=x(0)\exp(i\omega t)-i\left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\exp(i\omega t)\end{aligned} \tag{2.3.44}$$

のように書き直せる．両辺のエルミート的部分，エルミート交代的部分をそれぞれ等しいとすると

$$x(t)=x(0)\cos\omega t+\left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\sin\omega t \tag{2.3.45a}$$

と

$$p(t)=-m\omega x(0)\sin\omega t+p(0)\cos\omega t \tag{2.3.45b}$$

が導き出せる．これらは古典的な運動方程式と同じに見える．この x 演算子，

p 演算子は古典論の場合と同じように“振動している”のである.

教育的理由で,(2.3.45a)の別の導出法をここで紹介しよう.ハイゼンベルクの運動方程式を解くのではなくて

$$x(t) = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)x(0)\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) \qquad (2.3.46)$$

を評価することを試みる.そのために,非常に有用な公式

$$\exp(iG\lambda)A\exp(-iG\lambda) = A + i\lambda[G, A] + \left(\frac{i^2\lambda^2}{2!}\right)[G,[G, A]] + \cdots\cdots$$
$$+ \left(\frac{i^n\lambda^n}{n!}\right)[G,[G,\cdots\cdots[G,A]\cdots]] + \cdots\cdots \qquad (2.3.47)$$

を書いておこう.ここで G はエルミート演算子で λ は実数パラメータである.**ベーカー・ハウスドルフの補助定理**として知られるこの公式の証明は,演習問題に残しておく.この公式を(2.3.46)に適用すれば

$$\exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)x(0)\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)$$
$$= x(0) + \left(\frac{it}{\hbar}\right)[H, x(0)] + \left(\frac{i^2t^2}{2!\,\hbar^2}\right)[H, [H, x(0)]] + \cdots \qquad (2.3.48)$$

が得られる.右辺の各項は

$$[H, x(0)] = \frac{-i\hbar p(0)}{m} \qquad (2.3.49a)$$

および

$$[H, p(0)] = i\hbar m\omega^2 x(0) \qquad (2.3.49b)$$

を繰り返し用いて,x または p に還元できる.すると

$$\exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)x(0)\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) = x(0) + \left[\frac{p(0)}{m}\right]t - \left(\frac{1}{2!}\right)t^2\omega^2x(0)$$

$$-\frac{1}{3!}\frac{t^3\omega^2 p(0)}{m}+\cdots\cdots$$

$$=x(0)\cos\omega t+\left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\sin\omega t \qquad (2.3.50)$$

となり，(2.3.45a) と一致する．

(2.3.45a) と (2.3.45b) を見て，$\langle x\rangle$ と $\langle p\rangle$ は常に角振動数 ω で振動しているのだと結論したくなるかも知れない．しかしその推論は正しくない．ある決まった n の値を持つ，エネルギー固有状態を取ろう．期待値 $\langle n|x(t)|n\rangle$ は，演算子 $x(0)$ および $p(0)$ が n を ± 1 だけ変え，$|n\rangle$ と $|n\pm 1\rangle$ が直交することからゼロとなる．この点は，定常状態に関してとった観測量の期待値は時間変化しない，という以前の我々の結論（2.1節を見よ）からも明らかである．古典的振動子と似た振動を観測するには，エネルギー固有状態の重ね合せ，例えば

$$|\alpha\rangle=c_0|0\rangle+c_1|1\rangle \qquad (2.3.51)$$

に注目しなければならない．(2.3.51) に関して取った $x(t)$ の期待値が振動することを，読者は容易に確かめられよう．

エネルギー固有状態は n がどんなに大きくても，x や p の期待値が振動している訳ではないので，古典的振動子のような振舞いをしないことが分かった．では一体，古典的振動子と一番よく似たエネルギー固有状態の重ね合せを，どうしたら作れるだろうか．波動関数の言葉でいえば，形が拡がらずに前後に運動する波束が欲しいのである．非エルミート的な消滅演算子 a の固有値方程式

$$a|\lambda\rangle=\lambda|\lambda\rangle \qquad (2.3.52)$$

により定義されるコヒーレント状態が，この役割をすることが分かる．ここで λ は一般に複素数固有値である．このコヒーレント状態は，他にも多くの特徴

ある性質を持つ：

1．エネルギー（あるいはN）の固有状態の重ね合せとして

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)|n\rangle \tag{2.3.53}$$

のように表わすとき，$|f(n)|^2$ の n に関する分布は，ある平均値 $\bar{n}$ のまわりでポアソン型である：

$$|f(n)|^2 = \left(\frac{\bar{n}^n}{n\,!}\right)\exp(-\bar{n}). \tag{2.3.54}$$

2．これは振動子の基底状態を，ある有限な距離だけ移動させることにより得られる．

3．これは常に不確定関係の積を最小にしている．

コヒーレント状態の系統的な研究は，R. グラウバーを草分けとするが，非常にやり甲斐のある仕事である．この問題に関する章末の演習を，ぜひ解くように読者に勧めたい*.

2.4 シュレーディンガーの波動方程式

時間に依存する波動方程式

ここでシュレーディンガー表示に戻り，x-表示で $|\alpha, t_0; t\rangle$ の時間的発展を調べよう．すなわち我々の為すべきことは，波動関数

$$\psi(\mathbf{x}',t) = \langle \mathbf{x}'|\alpha, t_0; t\rangle \tag{2.4.1}$$

の振舞いを，時間の関数として調べることである．ここで $|\alpha, t_0; t\rangle$ は時刻 t でのシュレーディンガー表示の状態ケットであり，$\langle \mathbf{x}'|$ は時間によらない固

* レーザー物理への応用に関しては，Sargent，Scully and Lamb（1974）を見よ．

有ブラで固有値 $\boldsymbol{x}'$ を持つ．ハミルトン演算子を

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{x}) \tag{2.4.2}$$

のようにとる．ポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ はエルミート演算子である．また，それは局所的，すなわち $V(\boldsymbol{x}')$ を $\boldsymbol{x}'$ の実関数として

$$<\boldsymbol{x}''|V(\boldsymbol{x})|\boldsymbol{x}'> = V(\boldsymbol{x}')\delta^3(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}'') \tag{2.4.3}$$

が成り立つとする．本書では後にもっと複雑なハミルトニアン——時間依存性のあるポテンシャル $V(\boldsymbol{x}, t)$，非局所的だが分離型で(2.4.3)の右辺が $v_1(\boldsymbol{x}'')v_2(\boldsymbol{x}')$ に代わったポテンシャル，$\boldsymbol{A}$ を電磁気学のベクトルポテンシャルとして，$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$ の形をした運動量依存性のある相互作用など——を考察する．

ここで時間に依存するシュレーディンガーの波動方程式を導こう．はじめに状態ケットに対するシュレーディンガー方程式(2.1.27)を $\boldsymbol{x}$-表示で書く：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}<\boldsymbol{x}'|\alpha, t_0; t> = <\boldsymbol{x}'|H|\alpha, t_0; t>. \tag{2.4.4}$$

このとき，シュレーディンガー表示の位置固有ブラは時間がたっても変化しないことを用いた．(1.7.20)を用いれば(2.4.4)の右辺の運動エネルギーの寄与を

$$\left<\boldsymbol{x}'\left|\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right|\alpha, t_0; t\right> = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla'^2<\boldsymbol{x}'|\alpha, t_0; t> \tag{2.4.5}$$

と書ける．$V(\boldsymbol{x})$ に関しては

$$<x'|V(\boldsymbol{x}) = <x'|V(\boldsymbol{x}') \tag{2.4.6}$$

を用いる．この $V(\boldsymbol{x}')$ はもはや演算子ではない．以上をまとめると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \boldsymbol{x}'|\alpha,\, t_0\,;\, t\rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla'^2\langle \boldsymbol{x}'|\alpha,\, t_0\,;\, t\rangle + V(\boldsymbol{x}')\langle \boldsymbol{x}'|\alpha,\, t_0\,;\, t\rangle \tag{2.4.7}$$

が導ける．これが普通

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}',\, t) = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla'^2\psi(\boldsymbol{x}',\, t) + V(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}',\, t) \tag{2.4.8}$$

と書かれている，E. シュレーディンガーの有名な時間に依存する波動方程式であることが分かる．

波動方程式(2.4.8)に基づく量子力学は**波動力学**と呼ばれている．この方程式は事実，多くの量子力学の教科書の出発点になっている．しかし我々の定式化では，これはまさに，ハミルトン演算子を(2.4.2)にとったときの状態ケットに対するシュレーディンガー方程式であり，具体的に $\boldsymbol{x}$-基底で表わしたものである．

時間に依存しない波動方程式

こんどはエネルギー固有関数が満たす偏微分方程式を導こう．2.1節で定常状態の時間依存性が $\exp(-iE_{a'}t/\hbar)$ で与えられることを示した．したがって波動関数は

$$\langle \boldsymbol{x}'|a',\, t_0\,;\, t\rangle = \langle \boldsymbol{x}'|a'\rangle\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \tag{2.4.9}$$

と書ける．ここで系は初めに A と H の同時固有状態にあり，固有値はそれぞれ a' と $E_{a'}$ であったとする．(2.4.9)を時間に依存するシュレーディンガー方程式(2.4.7)に代入すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2\langle \boldsymbol{x}'|a'\rangle + V(\boldsymbol{x}')\langle \boldsymbol{x}'|a'\rangle = E_{a'}\langle \boldsymbol{x}'|a'\rangle \tag{2.4.10}$$

が導かれる．この偏微分方程式を満たすのは，エネルギー固有値 E_α を持つエネルギーの固有関数 $<\boldsymbol{x}'|a'>$ である．ところで実際にハミルトン演算子が $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{p}$ の関数として(2.4.2)のように与えられる波動力学では，H と交換する観測量 A を具体的に示す必要がない．$\boldsymbol{A}$ を観測量 $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{p}$ の関数として，H 自身と一致するようにいつでも選ぶことができるからである．したがって，a' を示すのをやめ，(2.4.10)を単にエネルギー固有関数 $u_E(x')$ が満たす偏微分方程式として

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\boldsymbol{\nabla}'^2 u_E(\boldsymbol{x}')+V(\boldsymbol{x}')u_E(\boldsymbol{x}')=Eu_E(\boldsymbol{x}') \qquad (2.4.11)$$

と書くことができる．これがE. シュレーディンガーの**時間に依存しない波動方程式**であり，波動力学の基礎となったものである．これはすべて1926年の前半に書かれた四つの記念碑的論文の，第一論文の中で発表された．同じ論文で彼は(2.4.11)を直ちに応用し，水素原子のエネルギースペクトルを導いている．

(2.4.11)を解くにはある境界条件を課す必要がある．(2.4.11)の解を

$$E<\lim_{|\boldsymbol{x}'|\to\infty} V(\boldsymbol{x}') \qquad (2.4.12)$$

の範囲で捜すことにしよう．この不等式はどの方向に $|\boldsymbol{x}'|\to\infty$ としても成立するものとする．この場合，用いるべき適切な境界条件は

$$u_E(\boldsymbol{x}')\to 0\ ,\quad |\boldsymbol{x}'|\to\infty \text{ のとき} \qquad (2.4.13)$$

である．物理的にいうと，これは粒子が束縛されている，すなわち空間のある有限領域の内に閉じこめられていることを意味する．偏微分方程式の理論によれば，境界条件(2.4.13)の下で(2.4.11)には，E の不連続な値の組に対してのみ，意味のある解が許される．時間に依存しないシュレーディンガー方程式(2.4.11)からエネルギー準位の量子化が生じる*というのはこの意味である．

* (2.4.11)を発表したシュレーディンガーの論文は，いみじくも Quantisierung als Eigenwert-problem (固有値問題としての量子化)と題してある．

一たび偏微分方程式(2.4.11)を書いてしまえば，微視的物理系のエネルギー準位を見出す問題は，振動している弦や膜の固有振動数を見つけるのと同じようにまっしぐらにできる．どちらの場合にも物理数学の境界値問題を解くのである．

ここでちょっと，脱線して量子力学の歴史を見てみよう．偏微分方程式の理論で厳密に解ける固有値問題が，行列の方法でも扱えることは，20世紀はじめの$\frac{1}{4}$世紀には数学者達の知るところであった．さらにM. ボルンのような理論物理学者は，当時の大数学者――特にD. ヒルベルトとH. ワイル――にしばしば意見をあおいでいる．しかし1925年の夏，行列力学が生まれたとき，理論物理学者にも数学者にも，それを偏微分方程式の言葉を用いて再構成しようという動きは，すぐには起きなかった．ハイゼンベルクの先駆的論文が出て6ヵ月後に，波動力学がシュレーディンガーによって提出された．けれども彼の論文をつぶさに見ると彼はハイゼルベルク，ボルンおよびヨルダンの以前の仕事に全く影響を受けなかったことが分かる．その代りに，シュレーディンガーを波動力学の定式化に導いた推論の道筋は，後に言及するW. R. ハミルトンの唱えた光学と力学との類似性，およびL. ド・ブロイの物質波の仮説に，その根源がある．そして波動力学が定式化されると，多くの人々がシュレーディンガー自身も含めて，波動力学と行列力学の同等性を示した．

この本の読者には，時間に依存する場合，依存しない場合の波動方程式を解いた経験がいくらかあることを想定している．読者はきっと自由空間でのガウス型の波束の時間的発展に慣れていることであろう．また長方形のポテンシャル障壁のある1次元の透過-反射問題などは，解けなければならない．時間に依存しない波動方程式の簡単な解の幾つか――箱の中の粒子，四角い井戸の中の粒子，調和振動子，水素原子など――は導いたことがあるとしている．またエネルギー固有関数と固有値の一般的性質，例えば(1)エネルギー準位のスペクトルは(2.4.12)が満たされるか否かで不連続か連続になるという事実や，(2)1次元のエネルギー固有関数は$E-V(\boldsymbol{x}')$が正か負かに依ってsine関数か減衰関数になるという特性などにも読者は通じていて欲しい．本書ではこうした

問題迄は扱わない．シュレーディンガー方程式の基本的な解は，付録Aに簡潔にまとめてある．

波動関数の解釈

ここで波動関数の物理的解釈の議論に移ろう．1.7節で $|\psi|^2$ の確率的解釈に言及したが，それは $\langle x'|\alpha, t_0; t\rangle$ が $|\alpha, t_0; t\rangle$ の位置固有ケット $\{|\boldsymbol{x}'\rangle\}$ による展開係数と見なせるという事実に基づく．したがって

$$\rho(\boldsymbol{x}', t) = |\psi(\boldsymbol{x}', t)|^2 = |\langle \boldsymbol{x}'|\alpha, t_0; t\rangle|^2 \tag{2.4.14}$$

で定義される量 $\rho(\boldsymbol{x}', t)$は，波動力学で**確率密度**とみなされている．特に検出器を使って $\boldsymbol{x}'$ のまわりの微小体積要素 $d^3\boldsymbol{x}'$ 内に粒子があるかどうかを確かめると，時刻 t で肯定的結果が記録される確率は $\rho(\boldsymbol{x}', t)d^3\boldsymbol{x}'$ で与えられる．

今後この節では，位置の演算子が現われないので x' の代りに x を用いる．時間に依存するシュレーディンガーの波動方程式を用いると，すぐに連続の方程式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0 \tag{2.4.15}$$

が導ける．ここで $\rho(\boldsymbol{x}, t)$は以前のように $|\psi|^2$ を表す．一方 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x}, t)$は**確率の流れ**（probability flux）と呼ばれ

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x}, t) &= -\left(\frac{i\hbar}{2m}\right)[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi] \\ &= \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\,(\psi^*\nabla\psi) \end{aligned}\tag{2.4.16}$$

で与えられる．ポテンシャル V が実数値であること(すなわち V 演算子のエルミート性)がこの結果を得るのに決定的な役割を果たした．逆に複素ポテンシャルを用いると，粒子の消滅を現象論的に説明できる．そのようなポテン

シャルは原子核反応で入射粒子が核に吸収される場合によく使われる．

確率の流れ $\boldsymbol{j}$ は運動量に関係があると，直観的に期待するかも知れない．全空間にわたって積分した $\boldsymbol{j}$ は，実際そうなっている．(2.4.16)から

$$\int d^3x\, \boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},\, t) = \frac{<\boldsymbol{p}>_t}{m} \tag{2.4.17}$$

が得られる．ここで $<\boldsymbol{p}>_t$ は，運動量演算子の時刻 t での期待値である．

等式(2.4.15)は，湧き出しも吸い込みもない領域での流体の流れを特徴づける流体力学の連続の方程式を思い出させる．事実，歴史的にシュレーディンガーは初め $|\psi|^2$ を実際の物質密度として，すなわち $e|\psi|^2$ を実際の電荷密度として解釈していた．もしこの見方を採用すると，ある奇妙な結果に出会うことになる．

この見方によれば位置の測定に関しての典型的な議論は次のようになるであろう．原子内電子を，核の周りの有限な空間領域を満たしている物質の連続した分布と見なすことにする．しかし，電子がある特定の点に居ることを確かめる測定を行うと，この物質の連続分布は空間的拡がりを持たない点状粒子に，突然縮んでしまうのである．$|\psi|^2$ を確率密度とするもっと満足できる統計的解釈は M. ボルンによって初めて与えられた．

波動関数の物理的意味を理解するために，ρ と S を実数の量として，波動関数を

$$\psi(\boldsymbol{x},\, t) = \sqrt{\rho(\boldsymbol{x},t)}\exp\left[\frac{iS(\boldsymbol{x},t)}{\hbar}\right] \tag{2.4.18}$$

と書こう．これは $\boldsymbol{x}$ と t の任意の複素関数についても，常に可能なことである．ρ の意味は既に与えてある．S の物理的解釈は何であろうか．次式

$$\psi^* \nabla \psi = \sqrt{\rho}\, \nabla(\sqrt{\rho}) + \frac{i}{\hbar}\rho \nabla S \tag{2.4.19}$$

に注目すると，確率の流れ[(2.4.16)を見よ]を

$$\boldsymbol{j}=\frac{\rho\nabla S}{m} \tag{2.4.20}$$

と書くことができる．ここで分かるように波動関数には $|\psi|^2$ が確率密度であるという事実だけでなく，さらに位相の勾配にもきわめて重要な情報が含まれているのである．(2.4.20)から，波動関数の位相の空間変化が確率の流れを示すことが分かる．位相変化が激しいほど，流れは強くなる．ある場所 $\boldsymbol{x}$ での $\boldsymbol{j}$ の方向は，その点を通る位相が一定な面の法線方向である．平面波(運動量の固有関数)という特に簡単な例では

$$\psi(\boldsymbol{x},t)\propto\exp\left(\frac{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}-\frac{iEt}{\hbar}\right) \tag{2.4.21}$$

において $\boldsymbol{p}$ は運動量演算子の固有値を表わし

$$\nabla S=\boldsymbol{p} \tag{2.4.22}$$

であるので，ここに述べたことはすべて明白である．さらに一般化して，$\nabla S/m$ をある種の“速度”

$$\text{“}\boldsymbol{v}\text{”}=\frac{\nabla S}{m} \tag{2.4.23}$$

と見なし，連続の方程式(2.4.15)を流体力学で扱うように

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\,\text{“}\boldsymbol{v}\text{”})=0 \tag{2.4.24}$$

と書きたくなる．しかし，$\boldsymbol{j}$ をあまり文字通りに解釈し，空間の各点で定義された速度かける密度とするのは危険であると読者に警告したい．なぜかというと，位置と速度を同時に正確に測定することは，必然的に不確定原理に反するのである．

古典的極限

次に波動力学の古典的極限を検討する．はじめに，(2.4.18)の形に表わした ψ を，時間に依存する波動方程式の両辺に代入する．正直に微分していくと

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\times\left[\nabla^2\sqrt{\rho}+\frac{2i}{\hbar}(\nabla\sqrt{\rho})\cdot(\nabla S)-\frac{1}{\hbar^2}\sqrt{\rho}\,|\nabla S|^2\right.$$

$$\left.+\frac{i}{\hbar}\sqrt{\rho}\,\nabla^2 S\right]+\sqrt{\rho}\,V=i\hbar\left[\frac{\partial\sqrt{\rho}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\sqrt{\rho}\frac{\partial S}{\partial t}\right] \tag{2.4.25}$$

になる．ここまではすべて厳密である．ここで $\hbar$ を，ある意味で小さな量と見なせると仮定しよう．この近似の正確な物理的意味は，もう少し先で問題にするが，今のところ明白でない．しかし

$$\hbar\,|\nabla^2 S|\ll|\nabla S|^2 \tag{2.4.26}$$

などと仮定してみよう．すると(2.4.25)の中で $\hbar$ をあからさまに含まない項を集めることができ，S に関する非線形の偏微分方程式

$$\frac{1}{2m}|\nabla S(\boldsymbol{x},t)|^2+V(\boldsymbol{x})+\frac{\partial S(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}=0 \tag{2.4.27}$$

が得られる．この式は1836年に初めて書かれた，古典力学の**ハミルトン-ヤコビの方程式**であることが分かる．ここで $S(\boldsymbol{x},t)$ はハミルトンの主関数を表わす．つまり驚くことではないが，$\hbar\to 0$ の極限で，シュレーディンガーの波動力学に古典力学が含まれているのである．ここで波動関数の位相には半古典的解釈がつけられる．すなわち，$\hbar$ を小さな量と見なすことができると，位相に $\hbar$ をかけたものはハミルトンの主関数に等しい．

さてここで時間依存性が $\exp(-iEt/\hbar)$ である定常状態を調べよう．この時間依存性は，古典系でハミルトニアンが一定の時，ハミルトンの主関数

S が

$$S(x,\, t) = W(x) - Et \tag{2.4.28}$$

のように分離できることから予想される．ここで $W(x)$ は**ハミルトンの特性関数**と呼ばれるものである．(Goldstein, 1980, pp.445～46)．時間の経過とともに，S が一定の面は，波動光学での位相一定の面——“波面”——が進むのとちょうど同じように進んでいく．古典的なハミルトン-ヤコビ理論で運動量は

$$\boldsymbol{p}_{古典的} = \nabla S = \nabla W \tag{2.4.29}$$

で与えられる．これは以前に我々が $\nabla S/m$ をある種の速度と同定したことと合致している．古典力学では速度ベクトルは粒子の軌跡の接線方向にあり，その結果速度ベクトルの方向を連続的に追っていくと，軌跡をたどることができる．軌跡をたどる ∇S が，一定の S で定義される波面と垂直なので，粒子の軌跡は幾何光学での光線に似ている．この意味で幾可光学の波動光学に対する関係は，古典力学の量子力学に対する関係と同じになる．

いまにしてみると，この光学-力学間のアナロジーがなぜ19世紀に十分には堀下げられなかったのか，不思議に思えるかも知れない．その訳はハミルトンの主関数を，ある進行波の位相と見たてるような動機がなかったためである．物質粒子の波動性は，1920年代迄は明らかになっていなかった．その上，作用の基本単位の $\hbar$ も，次元を合わすために(2.4.18)に入ってこなければいけないのだが，19世紀の物理学に欠けていた．

半古典的(WKB)近似

ここで1次元の場合に限り，シュレーディンガーの波動方程式の定常状態の近似解を求めよう．これは古典的なハミルトン-ヤコビ方程式の対応する解が

$$S(x,\, t) = W(x) - Et$$

$$= \pm \int^x dx' \sqrt{2m[E - V(x')]} - Et \qquad (2.4.30)$$

であることに着目すると，容易に行うことができる．定常状態ではすべての x に対して

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \qquad (2.4.31)$$

でなければならないが，連続の方程式［(2.4.24)を見よ］

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho \frac{\partial S}{\partial x}\right) = 0 \qquad (2.4.32)$$

を使うと $\rho\partial S/\partial x=$ 一定値 が導かれる．これに（2.4.30）を入れると

$$\rho\frac{dW}{dx} = \pm\rho\sqrt{2m[E - V(x)]} = \text{一定値} \qquad (2.4.33)$$

となるので

$$\sqrt{\rho} = \frac{\text{一定値}}{[E - V(x)]^{1/4}} \propto \frac{1}{\sqrt{v_{\text{古典的}}}} \qquad (2.4.34)$$

が得られる．古典論ではある場所に粒子を見出す確率は速度に逆比例すべきだから，これはもっともな結果である．以上をまとめると，近似解として

$$\psi(x, t) \simeq \left\{\frac{\text{一定値}}{[E - V(x)]^{1/4}}\right\} \exp\left[\pm\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int^x dx'\sqrt{2m[E - V(x')]} - \frac{iEt}{\hbar}\right] \qquad (2.4.35)$$

が得られる．これはG. ウェンツェル，A. クラマースおよびL. ブリルアンにちなみWKB解と呼ばれている*.

(2.4.35)が得られたところで，前に戻って $\hbar$ が小さいという意味を

* 似かよった手法が，これ以前にH. ジェフリーにより用いられていたので，この解をイギリスの本ではJWKB解と呼ぶこともある．

考えてみよう．シュレーディンガー方程式からハミルトン-ヤコビ方程式を導くときのよりどころは(2.4.26)であった．１次元の問題ではこれは

$$\hbar \left| \frac{d^2 W}{dx^2} \right| \ll \left| \frac{dW}{dx} \right|^2 \tag{2.4.36}$$

と同値である．この条件をド・ブロイ波長を 2π で割った $\lambda\!\!\!^{-}=\lambda/(2\pi)$ で書くと

$$\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m[E - V(x)]}} \ll \frac{2[E - V(x)]}{|dV/dx|} \tag{2.4.37}$$

となる．いいかえれば $\lambda\!\!\!^{-}$ は，ポテンシャルの変化が見分けられるだけの特徴的な長さに較べて小さくなければならない．粗っぽくいうと幾波長にもわたってポテンシャルは，実質上一定でなければならない．これから半古典的描像が信頼できるのは，短波長の極限であることが分かる．

解(2.4.35)は，古典的に許される $E-V(x)$ が正の領域で導かれている．次に古典的には許されない，$E-V(x)$ が負の領域を考えよう．古典的なハミルトン-ヤコビ理論は，この際意味を持たないので，$E>V$ に対して有効な近似解(2.4.35)を修正する必要がある．幸いにして $E<V$ の領域で類似した解がある．直接代入してみることにより

$$\psi(x, t) \simeq \left\{\frac{\text{一定値}}{[V(x)-E]^{1/4}}\right\}\exp\left[\pm\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int^x dx'\sqrt{2m[V(x')-E]} - \frac{iEt}{\hbar}\right] \tag{2.4.38}$$

が波動方程式を満たすことが，$\hbar/\sqrt{2m(V-E)}$ がポテンシャル変化の特徴的な長さにくらべて小さいという条件下で確かめられる．

(2.4.35)も(2.4.38)も

$$V(x) = E \tag{2.4.39}$$

となる x の値で定義される古典的な転回点近傍では，意味を持たない．この点では $\lambda\!\!\!^{-}$(ないし対応する純虚数のもの)が無限大となり(2.4.37)に全く反する

ことになるからである．実際，古典的転回点をはさんで二つの解をうまく合わせるのは，あまり簡単なことではない．標準的手法では次の手続を踏む．

1．(2.4.39)の根で定義される転回点 x_0 の近くで，ポテンシャル $V(x)$ を１次関数で近似する．

2．微分方程式

$$\frac{d^2u_E}{dx^2}-\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=x_0}(x-x_0)u_E=0 \qquad (2.4.40)$$

を厳密に解き，$\pm\frac{1}{3}$ 次のベッセル関数を含む x_0 近傍で有効な第３の解を得る．

3．いろいろな積分定数を適当に選んで，この解と他の二つの解が合うようにする．

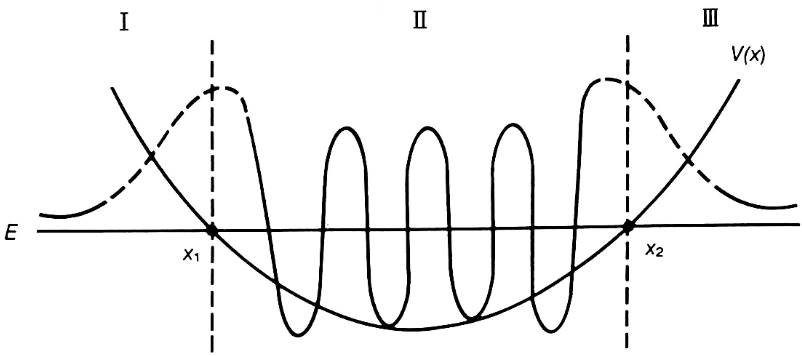


図 2.1. 転回点 x_1, x_2を持つポテンシャルの谷 $V(x)$中での，波動関数 $u_E(x)$の振舞いを示す概念図

この手続の詳細は，多くの本の中(例えば Schiff, 1968, pp.268～76)で議論されているので，ここで述べない．その代わりに，図2.1で示すような二つの転回点 x_1 および x_2 を持つポテンシャルの谷に対して行った，解析の結果を与えておこう．波動関数は領域 Ⅱ で(2.4.35)のように，また領域 Ⅰ と Ⅲ

で(2.4.38)のように振舞わなければならない．領域 I から II へ正しくつなぐには，積分定数を選んで次のようにしておけばよいことが示せる．すなわち*

$$\left\{\frac{1}{[V(x)-E]^{1/4}}\right\}\exp\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_x^{x_1}dx'\sqrt{2m[V(x')-E]}\right]$$

$$\longrightarrow\left\{\frac{2}{[E-V(x)]^{1/4}}\right\}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}dx'\sqrt{2m[E-V(x')]}-\frac{\pi}{4}\right]\quad(2.4.41)$$

とつなぎ，同様に領域 III から II へは

$$\left\{\frac{1}{[V(x)-E]^{1/4}}\right\}\exp\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{x_2}^{x}dx'\sqrt{2m[V(x')-E]}\right]$$

$$\longrightarrow\left\{\frac{2}{[E-V(x)]^{1/4}}\right\}\cos\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{x}^{x_2}dx'\sqrt{2m[E-V(x')]}+\frac{\pi}{4}\right]\quad(2.4.42)$$

とつなぐ．領域 II での波動関数の一価性から，(2.4.41)と(2.4.42)のコサインの中身がたかだか π の整数倍だけ違う [(2.4.42)の両辺の符号がともに変ってもよいので 2π ではない] ことが要求される．こうして，非常に興味ある一致の条件

$$\int_{x_1}^{x_2}dx\sqrt{2m[E-V(x)]}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar\qquad(n=0,1,2,3,\cdots)\quad(2.4.43)$$

が得られる．この方程式は $n+\frac{1}{2}$ と n との違いは別にすると，まさに A. ゾン

---

* (2.4.41)に $\pi/4$ が現われるわけを手短かに理解するには，次のようにする．それぞれ(2.4.38)と(2.4.35)の形をしている領域 I および II の一対の解は，正しくつないだとき，複素 x-平面での解析接続により相互に関連していなければならない．複素 x-平面まで拡げると $V(x)-E\simeq(dV/dx)_{x=x_1}(x-x_1)$ の符号を，$x\simeq x_1$ の危険な領域を通らずに変えることができる．するとこの解析接続の際，(2.4.38)中の因子 $1/[V(x)-E]^{1/4}$ から位相因子が出ることが分かる：$[(dV/dx)_{x=x_1}(x-x_1)]^{1/4}\to[(dV/dx)_{x=x_1}(x_1-x)]^{1/4}e^{i\pi/4}$.

マーフェルトと W. ウィルソンによる前期量子論の量子条件である．後者は1915年にはじめて

$$\oint pdq = nh \tag{2.4.44}$$

の形に書かれた．この式中の h はプランクの h でディラックの $\hbar$ ではなく，積分は古典的運動の一周期全体にわたって，x_1 から x_2 までおよびその逆を含んで計算する．

方程式(2.4.43)は，ポテンシャルの谷に閉じこめられた粒子のエネルギー準位を近似的に得るのに用いられる．例として，固い面に当たって上下に弾んでいるボールのエネルギー・スペクトルを考えよう．ポテンシャルは，x を固い面から測ったボールの高さとして

$$V = \begin{cases} mgx, & x>0 \\ \infty, & x<0 \end{cases} \tag{2.4.45}$$

である．ここでこの問題の古典的転回点である

$$x_1 = 0, \quad x_2 = \frac{E}{mg} \tag{2.4.46}$$

を代入して直接(2.4.43)を使いたくなるかも知れない．しかし，気をつけなくてならないことだが，(2.4.43)は WKB の波動関数が $x \leq x_1$ の領域にも“洩れ出す”ことを前提に導かれたのに対し，我々の問題では $x \leq x_1 = 0$ に対し波動関数が厳密にゼロでなければならない．この問題を解くのにはるかに満足のいく方法は

$$V(x) = mg|x|, \quad (-\infty < x < \infty) \tag{2.4.47}$$

として，転回点が

$$x_1 = -\frac{E}{mg}, \qquad x_2 = \frac{E}{mg} \tag{2.4.48}$$

である修整された問題の奇関数の解— $x=0$ でゼロになることが保証された解—を考えることである．修整された問題でパリティ奇の状態のエネルギー・スペクトルは，明らかにもとの問題のそれと同一であるに違いない．すると量子化条件は

$$\int_{-E/mg}^{E/mg} dx\sqrt{2m(E-mg|x|)} = \left(n_{\text{odd}}+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar, \quad (n_{\text{odd}}=1,3,5,\cdots) \tag{2.4.49}$$

または，これと同値な

$$\int_{0}^{E/mg} dx\sqrt{2m(E-mgx)} = \left(n-\frac{1}{4}\right)\pi\hbar, \quad (n=1,2,3,4,\cdots) \tag{2.4.50}$$

となる．この初等的積分を行うと，弾んでいるボールの量子化エネルギー準位として

$$E_n = \left\{\frac{\left[3\left(n-\frac{1}{4}\right)\pi\right]^{2/3}}{2}\right\}(mg^2\hbar^2)^{1/3} \tag{2.4.51}$$

が得られる．

この問題は近似を使わず解析的に解けることが知られている．エネルギー固有値はエアリー（Airy）関数のゼロ点

$$\mathrm{Ai}(-\lambda_n)=0 \tag{2.4.52}$$

を用いて

$$E_n = \left(\frac{\lambda_n}{2^{1/3}}\right)(mg^2\hbar^2)^{1/3} \tag{2.4.53}$$

のように表現できることが分かる．この二つの方法は，はじめの10個のエネルギー準位に対して表2.2で数値的に比較してある．これを見て分かるように，

小さな n の値に対してさえも一致は非常に良く，$n \simeq 10$ では実際上，厳密に一致している．［訳注：WKB は一般に n の大きい短波長領域でよい近似である．］

表 2.2. 弾んでいるボールの量子化エネルギー．単位は $(mg^2\hbar^2/2)^{1/3}$ である．

n	WKB	Exact
1	2.320	2.338
2	4.082	4.088
3	5.517	5.521
4	6.784	6.787
5	7.942	7.944
6	9.021	9.023
7	10.039	10.040
8	11.008	11.009
9	11.935	11.936
10	12.828	12.829

弾んでいるボールを量子論的に扱うことなど，現実の世界とはあまり関係がないように見えよう．ところが，(2.4.45)の形のポテンシャルは**クォークニウム**と呼ばれるクォークと反クォークが結合した系のエネルギー・スペクトルを調べるとき，実際に有用である†．弾んでいるボールからクォークニウムに移るには，(2.4.45)中の x を，クォーク・反クォーク間の距離 r に置きかえる．下向きの重力 mg に対応するのは，クォークと反クォークの間に働いていると信じられる，一定の(すなわち r に依存しない)力である．この力は経験的に

$$1\mathrm{GeV/fm} \simeq 1.6 \times 10^5\,\mathrm{N} \tag{2.4.54}$$

(つまり約16トンの重さに相当する値)の近傍にあると推定されている．これは100 g のボールに働く0.98 N の重力と対照的である．

† 訳注：MOS 表面層の電子に対しても(2.4.45)の形のポテンシャルが用いられる．

2.5 プロパゲーターとファインマンの経路積分

波動力学でのプロパゲーター

2.1節で示したように，ハミルトニアンに時間依存性がないときの最も一般的な時間的発展の問題は，初期ケットを H と交換するある観測量の固有ケットで展開しておけば，解くことができる．このことを波動力学の言葉に焼き直してみよう．まず

$$
\begin{aligned}
|\alpha, t_0 ; t\rangle &= \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]|\alpha, t_0\rangle \\
&= \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0\rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right]
\end{aligned} \tag{2.5.1}
$$

から始める．両辺に左から $\langle \boldsymbol{x}'|$ をかけると

$$
\langle \boldsymbol{x}'|\alpha, t_0 ; t\rangle = \sum_{a'}\langle \boldsymbol{x}'|a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0\rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right] \tag{2.5.2}
$$

となるが，これは

$$
\psi(\boldsymbol{x}', t) = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) u_{a'}(\boldsymbol{x}') \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right] \tag{2.5.3}
$$

という形をしており，ここで

$$
u_{a'}(\boldsymbol{x}') = \langle \boldsymbol{x}'|a'\rangle \tag{2.5.4}
$$

は演算子 A の固有値 a' を持つ固有関数を表わす．また

$$
\langle a'|\alpha, t_0\rangle = \int d^3x' \langle a'|\boldsymbol{x}'\rangle\langle \boldsymbol{x}'|\alpha, t_0\rangle \tag{2.5.5}
$$

であることにも注目しよう．これは波動力学で初期状態の展開係数を得るための通常の規則

$$c_{\alpha}(t_0)=\int d^3x' u_{\alpha}{}^*(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}',\, t_0) \tag{2.5.6}$$

になっていることが分かる．

以上はすべて，簡単でよく分かっていることである．さて(2.5.2)式は(2.5.5)と一緒にすると，始状態の波動関数に作用して終状態の波動関数を得る一種の積分演算子と見ることもできる：

$$\psi(\boldsymbol{x}'',\, t)=\int d^3x' K(\boldsymbol{x}'',\, t\,;\, \boldsymbol{x}',\, t_0)\psi(\boldsymbol{x}',\, t_0). \tag{2.5.7}$$

ここで積分演算子の積分核は，波動力学で**プロパゲーター**と呼ばれる関数で

$$K(\boldsymbol{x}'',\, t\,;\, \boldsymbol{x}',\, t_0)=\sum_{a'}\langle \boldsymbol{x}''|a'\rangle\langle a'|\boldsymbol{x}'\rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right] \tag{2.5.8}$$

で与えられる．どのような問題であっても，プロパゲーターはポテンシャルにのみ依存し，始状態の波動関数にはよらない．ひとたびエネルギー固有関数と固有値が与えられれば，プロパゲーターを作ることができる．

明らかに波動関数の時間的発展は，$K(\boldsymbol{x}'', t\,;\, \boldsymbol{x}', t_0)$が知られていて，$\psi(\boldsymbol{x}', t_0)$が初めに与えられれば，完全に予知できる．この意味でシュレーディンガーの波動力学は，完全に因果律にかなう理論である．あるポテンシャルの下での波動関数の時間的発展は，系が乱されずにいる限り古典力学での場合と同じように，“決定論的”である．もし何か特異な面があるとすれば測定が邪魔をするときで，波動関数は測定される観測量のある一つの固有関数に突然変化し，この変化を制御することはできない．

ここで記しておきたいプロパゲーターの二つの性質がある．第一に$t>t_0$であれば$K(\boldsymbol{x}'', t\,;\, \boldsymbol{x}', t_0)$は$\boldsymbol{x}'$と$t_0$を固定し$\boldsymbol{x}''$と$t$を変数として，シュレーディンガーの時間に依存する波動方程式を満足する．これは(2.5.8)から

明らかなことである．なぜなら $\langle \boldsymbol{x}''|a'\rangle \exp[-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar]$ が $\mathcal{U}(t,t_0)|a'\rangle$ に対応する波動関数であり，波動方程式を満足するからである．第二にこれもまた自明なことであるが

$$\lim_{t\to t_0} K(\boldsymbol{x}'',t;\boldsymbol{x}',t_0)=\delta^3(\boldsymbol{x}''-\boldsymbol{x}') \tag{2.5.9}$$

が成り立つ．$t\to t_0$ では(2.5.8)の和は $\{|a'\rangle\}$ の完全性を用いるとちょうど $\langle \boldsymbol{x}''|\boldsymbol{x}'\rangle$ に変わるからである．

この二つの性質によって，$\boldsymbol{x}''$ の関数とみなしたプロパゲーター(2.5.8)は，以前のある時刻 t_0 に正確に $\boldsymbol{x}'$ に局在していた粒子の，時刻 t での波動関数となる．実際この解釈は(2.5.8)が

$$K(\boldsymbol{x}'',t;\boldsymbol{x}',t_0)=\langle \boldsymbol{x}''|\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]|\boldsymbol{x}'\rangle \tag{2.5.10}$$

のようにも書けることに注意すればもっとエレガントに出てくる．上式で $|\boldsymbol{x}'\rangle$ に時間的発展の演算子をかけたものは，まさに時刻 $t_0\,(<t)$ で正確に $\boldsymbol{x}'$ に局在していた系の t における状態ケットである．もし初めの波動関数が空間の有限領域にわたって拡がっているような，もっと一般的な問題を解きたいのであれば，$\psi(\boldsymbol{x}',t_0)$ にプロパゲーター $K(\boldsymbol{x}'',t;\boldsymbol{x}',t_0)$をかけて，全空間にわたって(すなわち$\boldsymbol{x}'$ に関して)積分をしさえすればよい．このようにすれば異なった位置 $(\boldsymbol{x}')$ からの様々な寄与を加え合わせることができる．この状況は静電気学の場合とよく似ている．一般的な電荷分布 $\rho(\boldsymbol{x}')$ の作る静電ポテンシャルを見い出したいならば，まず点電荷の問題を解き，点電荷の解に電荷分布をかけて積分する：

$$\phi(\boldsymbol{x})=\int d^3x'\frac{\rho(\boldsymbol{x}')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}. \tag{2.5.11}$$

グリーン関数の理論になじみのある読者はここ迄の所で，このプロパゲーターは時間に依存する波動方程式のグリーン関数であって

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla''^2 + V(\mathbf{x}'') - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]K(\mathbf{x}'', t\,;\,\mathbf{x}', t_0)$$

$$= -i\hbar\,\delta^3(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')\delta(t - t_0) \tag{2.5.12}$$

を境界条件

$$K(\mathbf{x}'', t\,;\,\mathbf{x}', t_0) = 0, \qquad t < t_0 \tag{2.5.13}$$

の下で満足することを察知したに違いない．デルタ関数 $\delta(t-t_0)$ が(2.5.12)の右辺に必要なわけは，K が $t=t_0$ で不連続的に変わるからである．

プロパゲーターの個々の形は，もちろん粒子の受ける個々のポテンシャルに依っている．例として1次元の自由粒子を考えよう．H と交換することが明白な観測量は運動量である．$|p'\rangle$ は演算子 p と H との同時固有ケットである：

$$p|p'\rangle = p'|p'\rangle, \qquad H|p'\rangle = \left(\frac{p'^2}{2m}\right)|p'\rangle. \tag{2.5.14}$$

運動量の固有関数は，まさに1.7節の変換関数で [(1.7.32)を見よ]，平面波の形をしている．以上をまとめて

$$K(x'', t\,;\,x', t_0) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)\int_{-\infty}^{\infty} dp' \exp\left[\frac{ip'(x''-x')}{\hbar} - \frac{ip'^2(t-t_0)}{2m\hbar}\right] \tag{2.5.15}$$

となるが，この積分は指数関数の変数部を完全平方に直すと計算できる．ここでは単に結果を書いておく：

$$K(x'', t\,;\,x', t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}\exp\left[\frac{im(x''-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right]. \tag{2.5.16}$$

この表式は例えばガウス型の波束が，時間の関数としてどのように拡がっていくかを調べるのに使うことができる．

一方，調和振動子ではエネルギー固有状態の波動関数が

$$u_n(x')\exp\left(\frac{-iE_nt}{\hbar}\right)=\left(\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(\frac{-m\omega x'^2}{2\hbar}\right)$$

$$\times H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x'\right)\exp\left[-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t\right] \qquad (2.5.17)$$

で与えられるから，プロパゲーターは

$$K(x'',t;x',t_0)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin[\omega(t-t_0)]}}$$

$$\times\exp\left[\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin[\omega(t-t_0)]}\right\}\left\{(x''^2+x'^2)\cos[\omega(t-t_0)]-2x''x'\right\}\right] \qquad (2.5.18)$$

で与えられる．これを証明する一つの方法は，特殊関数について書かれた本(Morse and Feshbach, 1953, p.786)にある式

$$\left(\frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}}\right)\exp\left[\frac{-(\xi^2+\eta^2-2\xi\eta\zeta)}{(1-\zeta^2)}\right]$$

$$=\exp\left[-(\xi^2+\eta^2)\right]\sum_{n=0}\left(\frac{\zeta^n}{2^n n!}\right)H_n(\xi)H_n(\eta) \qquad (2.5.19)$$

を使うことである．あるいは a, $a^\dagger$ 演算子法(Saxon, 1968, pp.144～45)または後述する経路積分の方法を使っても求めることができる．(2.5.18)が t の周期関数であり，その角振動数が古典的振動子の角振動数 ω になっていることに注目して欲しい．これははじめ正確に x' に局在していた粒子が $2\pi/\omega$ ($4\pi/\omega$, などと続く)だけ時間が経つと，確かに元の場所に戻ってくることを意味している．

$K(\mathbf{x}'',t;\mathbf{x}',t_0)$ を空間や時間で積分していくと，重要な興味深い結果が得られる．以下では $t_0=0$ とおくがこれによって一般性は失われない．はじ

めに考える積分は，$\boldsymbol{x}''=\boldsymbol{x}'$ と置き全空間で積分することで得られる．すなわち

$$G(t)\equiv\int d^3x'K(\boldsymbol{x}',t;\boldsymbol{x}',0)$$
$$=\int d^3x'\sum_{a'}|<\boldsymbol{x}'|a'>|^2\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right)$$
$$=\sum_{a'}\exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \tag{2.5.20}$$

である．この結果は次のように考えれば予想できる．(2.5.10)にもどると $\boldsymbol{x}'=\boldsymbol{x}''$ と置き積分するということは，$\boldsymbol{x}$-表示で時間的発展の演算子のトレースを取ることと同等であることが分かる．ところでトレースは表示によらないので，時間的発展の演算子を対角的にする $\{|a'>\}$ を基底に用いればもっと簡単に計算することができ，(2.5.20)の最後の行に直接たどりつく．ここで(2.5.20)はちょうど“状態に関する和”になっているが，これは統計力学にでてくる分配関数を思い出させる．事実，変数 t を解析接続し t を純虚数にして正の実数 β を

$$\beta=\frac{it}{\hbar} \tag{2.5.21}$$

で定義すれば，(2.5.20)を分配関数

$$Z=\sum_{a'}\exp(-\beta E_{a'}) \tag{2.5.22}$$

そのものと同一視できる．したがって量子力学でプロパゲーターを学ぶ際に出会う技法のいくつかは，統計力学でも有用なのである．

　次に $G(t)$のラプラス・フーリエ変換を考えよう：

$$\tilde{G}\equiv-i\int_0^\infty dt\,G(t)\exp(iEt/\hbar)/\hbar$$
$$=-i\int_0^\infty dt\sum_{a'}\exp(-iE_{a'}t/\hbar)\exp(iEt/\hbar)/\hbar\,. \tag{2.5.23}$$

ここで被積分関数は，限りなく振動している．しかしEに小さな正の虚部を持たせ

$$E \to E + i\varepsilon \tag{2.5.24}$$

とすると積分が意味を持つようにすることができる．このとき $\varepsilon \to 0$ の極限で

$$\tilde{G}(E) = \sum_{\alpha} \frac{1}{E - E_{\alpha}} \tag{2.5.25}$$

となる．すべてのエネルギー・スペクトルが，複素E-平面での$\tilde{G}(E)$の1位の極によって表わされることに注目しよう．ある物理系のエネルギー・スペクトルが知りたければ，$\tilde{G}(E)$の解析的性質を調べれば十分である．

遷移振幅としてのプロパゲーター

プロパゲーターの持つ物理的意味をもっと深く知るために，これを2.2節で導入した遷移振幅という概念と関係づけてみたい．しかしはじめに思い出して欲しいのは，時間的に固定された位置ブラ$\langle \boldsymbol{x}' |$と，時間的に変化する状態ケット$| \alpha, t_0 ; t \rangle$との内積である波動関数が，時間の“逆向き”に動くハイゼンベルク表示の位置ブラ$\langle \boldsymbol{x}', t |$と，時間がたっても変化しないハイゼンベルク表示の状態ケット$| \alpha, t_0 \rangle$との内積とも見なせることである．同様にプロパゲーターもまた

$$\begin{aligned} K(\boldsymbol{x}'', t ; \boldsymbol{x}', t_0) &= \sum_{\alpha} \langle \boldsymbol{x}'' | a' \rangle \langle a' | \boldsymbol{x}' \rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar}\right] \\ &= \sum_{\alpha} \langle \boldsymbol{x}'' | \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) | a' \rangle \langle a' | \exp\left(\frac{iHt_0}{\hbar}\right) | \boldsymbol{x}' \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{x}'', t | \boldsymbol{x}', t_0 \rangle \end{aligned} \tag{2.5.26}$$

と書きかえることができる．ここで $|\boldsymbol{x}', t_0\rangle$ と $\langle\boldsymbol{x}'', t|$ は，ハイゼンベルク表示での位置演算子の固有ケットと固有ブラである．2.2節で示したように，ハイゼンベルク表示で記した $\langle b', t|a'\rangle$ は，あるはじめの時刻 $t_0=0$ に固有値 a' を持つ A の固有状態にあった系が，時間がたって t で固有値 b' を持つ B の固有状態に見出される確率振幅である．これを状態 $|a'\rangle$ から状態 $|b'\rangle$ へ移る遷移振幅と呼んだ．特に $t_0=0$ と選ぶ必要はなく大事なのは時間差 $t-t_0$ だから，$\langle\boldsymbol{x}'', t|\boldsymbol{x}', t_0\rangle$ を t_0 で位置固有値 $\boldsymbol{x}'$ を持つようにしておいた粒子が，後の時刻 t で $\boldsymbol{x}''$ に見出される確率振幅と同定することができる．大雑把にいうと $\langle\boldsymbol{x}'', t|\boldsymbol{x}', t_0\rangle$ は粒子がある時空の点 $(\boldsymbol{x}', t_0)$ から他の時空の点 $(\boldsymbol{x}'', t)$ へ移る振幅であり，これを表わすのに**遷移振幅**という言葉はまことに適当である．もちろんこの解釈は，以前 $K(\boldsymbol{x}'', t; \boldsymbol{x}', t_0)$ に与えた解釈と全く一致している．

$\langle\boldsymbol{x}'', t|\boldsymbol{x}', t_0\rangle$ を解釈するもう一つの方法は次のようである．以前強調したように，$|\boldsymbol{x}', t_0\rangle$ は t_0 で固有値 $\boldsymbol{x}'$ を持つハイゼンベルク表示の位置固有ケットである．任意の与えられた時刻で，ある観測量のハイゼンベルク表示の固有ケットを基底ケットに選べるから，$\langle\boldsymbol{x}'', t|\boldsymbol{x}', t_0\rangle$ は異なった時刻の2組の基底ケットを結ぶ変換関数とみなすことができる．したがってハイゼンベルク表示では，時間的発展を基底の変更の意味で，$\{|\boldsymbol{x}', t_0\rangle\}$ でつくられる基底ケットの組を $\{|\boldsymbol{x}'', t\rangle\}$ でつくられる他の基底の組に関連づけるユニタリー変換と見ることができる．この議論は古典物理学を思い出させる．古典論では古典的な力学変数，たとえば $\boldsymbol{x}(t)$ の時間発展は，古典的ハミルトニアンの生成するカノニカル(ないし接触)変換と見なされている(Goldstein, 1980, pp.407～8)．

空間および時間の座標をもっと体系的に扱う記法を用いるのが便利である．このために $\langle\boldsymbol{x}'', t|\boldsymbol{x}', t_0\rangle$ の代わりに $\langle\boldsymbol{x}'', t''|\boldsymbol{x}', t'\rangle$ と書こう．ハイゼンベルク表示の位置ケットは任意の時刻で完全系を作るから

$$\int d^3x''|\boldsymbol{x}'', t''\rangle\langle\boldsymbol{x}'', t''| = 1 \qquad (2.5.27)$$

のように書いた恒等演算子を，任意な個所に挿入することが許される．例えば t' から t''' への時間的発展を考えよう．時間間隔 (t', t''') を (t', t'') と (t'', t''') の二つの部分に分けると

$$\langle \boldsymbol{x}''', t''' | \boldsymbol{x}', t' \rangle = \int d^3x'' \langle \boldsymbol{x}''', t''' | \boldsymbol{x}'', t'' \rangle \langle \boldsymbol{x}'', t'' | \boldsymbol{x}', t' \rangle, \quad (t''' > t'' > t') \tag{2.5.28}$$

となる．これを遷移振幅の**合成の性質**と呼ぶ*．時間間隔を多くのさらに小さな領域に好きな様に分けることができるのは明らかである．すると

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{x}'''', t'''' | \boldsymbol{x}', t' \rangle = \int d^3x''' \int d^3x'' \langle \boldsymbol{x}'''', t'''' | \boldsymbol{x}''', t''' \rangle \\ \times \langle \boldsymbol{x}''', t''' | \boldsymbol{x}'', t'' \rangle \langle \boldsymbol{x}'', t'' | \boldsymbol{x}', t' \rangle, \\ (t'''' > t''' > t'' > t')\end{aligned} \tag{2.5.29}$$

が成り立つ．$\langle \boldsymbol{x}'', t'' | \boldsymbol{x}', t' \rangle$ の形を，無限小時間間隔（t' と $t''=t'+dt$ の間）に対して何とか推量できれば，無限小時間間隔の適当な遷移振幅を(2.5.29)と似た方法で合成して，有限時間間隔の振幅 $\langle \boldsymbol{x}'', t'' | \boldsymbol{x}', t' \rangle$ を求めることができるに違いない．このような推論をすすめると，1948年にR. P. ファインマンにによって発表された，いままでの量子力学とは独立した定式化にたどりつく．そこで注意をこの理論に向けよう．

経路に関する和としての経路積分

1次元の問題に限っても一般性を失わない．また

$$x'''' \underset{N\text{回}}{\cdots} x'''$$

* (2.5.28)に類似な式は，確率論ではチャップマン・コルモゴロフ方程式と呼ばれ，拡散の理論では，スモルコフスキー方程式と呼ばれている．

のような不便な表現は避けて，x_Nといった記号を用いる．この記号を使って，ある粒子が時空の出発点(x_1, t_1)から時空の終点(x_N, t_N)へ移る遷移振幅を考えよう．t_1からt_Nまでの全時間間隔を$N-1$等分し，

$$t_j - t_{j-1} = \Delta t = \frac{t_N - t_1}{N-1} \tag{2.5.30}$$

とする．合成の性質を十分に利用すると

$$\begin{aligned} <x_N, t_N | x_1, t_1> = \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 <x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1}> \\ \times <x_{N-1}, t_{N-1} | x_{N-2}, t_{N-2}> \cdots <x_2, t_2 | x_1 t_1> \end{aligned} \tag{2.5.31}$$

が得られる．この式を図を使って理解するために，図2.2に示した時間-空間平面を考えよう．出発点と終点は(x_1, t_1)と(x_N, t_N)にそれぞれ固定してある．それぞれの時間区間，たとえばt_{n-1}とt_nとの間では(x_{n-1}, t_{n-1})から(x_n, t_n)へ移る遷移振幅を考えることにする．次に$x_2, x_3, \cdots, x_{N-1}$に関して積分する．すなわち，時空の平面内で固定した両端の間のすべての可能な経路の和を取らなければならない．

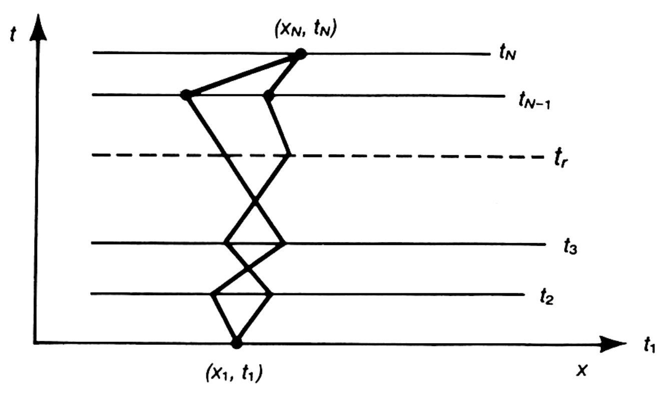


図 2.2.　xt-平面内の経路

先に進む前に，古典力学での経路の現われ方をここで復習しておくとよいだろう．ポテンシャル $V(x)$から導かれる力を受けている粒子を仮定しよう．古典的ラグランジアンは

$$L_{古典}(x, \dot{x}) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \tag{2.5.32}$$

である．このラグランジアンが与えられ，両端の点 (x_1, t_1) と (x_N, t_N) が指定されれば，(x_1, t_1) と (x_N, t_N) を結ぶ任意の経路など古典力学では考えない．古典的粒子の実際の運動に対応したただ一つの経路が存在するのである．例えば，

$$V(x) = mgx, \quad (x_1, t_1) = (h, 0), \qquad (x_N, t_N) = \left(0, \sqrt{\frac{2h}{g}}\right) \tag{2.5.33}$$

が与えられたとする．ここで h はピサの斜塔の高さを表わすとしてもよい．xt-平面の古典的な経路は

$$x = h - \frac{gt^2}{2} \tag{2.5.34}$$

だけが許される．さらに一般的に，ハミルトンの原理によればただ一つ決まる経路は，古典的ラグランジアンの時間積分で定義される作用量を最小にするものである．すなわち

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt L_{古典}(x, \dot{x}) = 0 \tag{2.5.35}$$

であり，この式からラグランジュの運動方程式が得られる．

ファインマンの理論

古典力学と量子力学の基本的な差は，もう明らかになったことと思う．古典力学では，xt-平面内のある定まった経路に，粒子の運動が結びついている．これに対して量子力学では，すべての可能な経路が，古典力学の経路とは

全く似つかないものも含めて，役割を持っている．しかしともかく $\hbar\to 0$ の極限で，古典力学と滑らかにつながっていなければならない．こういうことはどうすれば可能だろうか．

プリンストン大学の若い大学院生であったR. P. ファインマンが，この問題に挑戦した．解決の糸口を捜している中に，彼はディラックの本にある謎めいた指摘に興味をそそられたといわれている．それは我々の記法で次のように述べられる：

$$\exp\left[i\int_{t_1}^{t_2}\frac{dtL_{古典}(x,\,\dot{x})}{\hbar}\right] \quad は \quad \langle x_2,\, t_2|x_1,\, t_1\rangle \quad に対応する．$$

ファインマンはこの言葉の持つ意味をつかもうとした．“対応する”とは“等しい”と同じことだろうか，それとも“比例する”ということだろうか．このようにして彼は時空座標を用い経路積分に基づいて量子力学を定式化することができた．

ファインマンの理論では，古典力学の作用量が非常に重要な役割を果たす．簡潔に書くために，新しい記号

$$S(n,\, n-1)\equiv\int_{t_{n-1}}^{t_n}dtL_{古典}(x,\,\dot{x}) \tag{2.5.36}$$

を導入しよう．$L_{古典}$は x と $\dot{x}$ の関数なので $S(n,\, n-1)$は，その経路に添って積分を実行するべきある決った経路が指定されて，初めて定義される．したがってこの記号に経路依存性が具体的に記されてなくても，積分を計算する際にある決まった経路を考えているものと了解する．いまある指定された経路に添って進む場合を考えよう．この経路上の一小区間，例えば $(x_{n-1},\, t_{n-1})$ と $(x_n,\, t_n)$ の間に着目する．ディラックにならってこの部分に $\exp[iS(n,\, n-1)/\hbar]$を結びつけることにする．指定された経路をたどっていくと，この型の表式を順次掛け合せて

$$\prod_{n=2}^{N}\exp\left[\frac{iS(n,\, n-1)}{\hbar}\right]=\exp\left[\left(\frac{i}{\hbar}\right)\sum_{n=2}^{N}S(n,\, n-1)\right]$$

$$= \exp\left[\frac{iS(N, 1)}{\hbar}\right] \tag{2.5.37}$$

が得られる．この式は未だ$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$を与えるものではない．考慮した特別な経路からの$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$への寄与を表しているのである．さらに$x_2$, x_3, ……, x_{N-1}に関しての積分を行わなくてはならない．ここで合成の性質を利用し一方t_{n-1}とt_n間の時間差を無限小にする．すると$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$を表わす式の候補として，大体のところ

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle \sim \sum_{\text{あらゆる経路}} \exp\left[\frac{iS(N, 1)}{\hbar}\right] \tag{2.5.38}$$

と書けるであろう．この和は数えきれないほどの無限の経路の組についてとる！

もっと正確な定式化を述べる前に，この方向に添った議論が古典的極限で意味を持つかどうか検討しよう．$\hbar \to 0$とすると，(2.5.38)の指数は激しく振動し，隣り合う経路からの様々な寄与は互いに打ち消し合う傾向を持つ．ある決まった経路での$\exp[iS/\hbar]$と，少し違った経路での$\exp[iS/\hbar]$とは，$\hbar$が小さいので非常に異なった位相を持っているからである．したがって$\hbar$が小さな量と見なせるとき，ほとんどの経路は寄与しない．しかし重要な例外がある．

次式を満たす経路を考えることにしよう．

$$\delta S(N, 1) = 0 \tag{2.5.39}$$

ここでSの変化は，固定した両端の間の経路を少しばかり変えたことによる．上の式を満たす経路はまさに古典的経路であることが，ハミルトンの原理から分かる．(2.5.39)を満足するSを$S_{\min}$と記そう．ここで試みに経路を古典的経路から，少しばかり変形してみる．得られるSは変形に関して1次の範囲では，依然$S_{\min}$である．すなわち古典的経路からわずかにそれたときは，たとえ$\hbar$が小さくても$\exp[iS/\hbar]$の位相はあまり変らない．その結果，古典的

経路の近くにいる限り，隣接した経路間で強め合う干渉が可能になる．極限 $\hbar \to 0$ での主な寄与は，図2.3に示すように古典的経路をふくむ非常に狭い帯(高い次元では管)からくることになる．ディラックの謎めいた指摘に基づいた我々の(ファインマンの)推論は，$\hbar \to 0$ の極限で古典的経路が選び出されるので，理にかなっている．

ファインマンの推論をもっと正確に定式化するために，$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$ に戻ろう．ここで時刻の差 $t_n - t_{n-1}$ は無限小であると仮定する．これを

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \left[\frac{1}{w(\Delta t)}\right] \exp\left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar}\right] \tag{2.5.40}$$

と書き $S(n, n-1)$を $\Delta t \to 0$ の極限で計算しよう．ここに重みの因子 $1/w(\Delta t)$を入れたことに注意して欲しい．この因子は時刻差 $t_n - t_{n-1}$ のみに依り，$V(x)$には依らないと仮定しておく．こうした因子が必要なことは次元を考えれば明らかである．位置の固有ケットを規格化した我々の流儀では，$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$ は１／(長さ)の次元を持たなければならない．

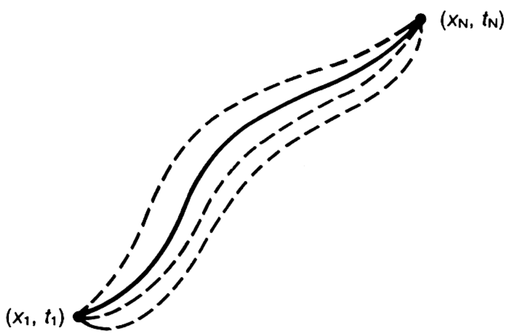


図 2.3.　$\hbar \to 0$ の極限で重要となる経路

つぎに(2.5.40)中の指数関数に着目しよう．行うべきことは $S(n, n-1)$の $\Delta t \to 0$ での極限を求めることである．時間間隔は非常に短いので，(x_{n-1}, t_{n-1}) と (x_n, t_n) を結ぶ経路を直線で近似し，次のように見積っても

構わない：

$$S(n,\ n-1)=\int_{t_{n-1}}^{t_n}dt\left[\frac{m\dot{x}^2}{2}-V(x)\right]$$

$$=\Delta t\left\{\frac{m}{2}\left[\frac{x_n-x_{n-1}}{\Delta t}\right]^2-V\left(\frac{x_n+x_{n-1}}{2}\right)\right\}. \tag{2.5.41}$$

例として $V=0$ の自由粒子の場合を考えよう．この場合，等式(2.5.40)は

$$<x_n,\ t_n|\,x_{n-1},\ t_{n-1}>=\left[\frac{1}{w\,(\Delta t)}\right]\exp\left[\frac{im(x_n-x_{n-1})^2}{2\hbar\,\Delta t}\right] \tag{2.5.42}$$

となる．ここに現われた指数は自由粒子のプロパゲーターの表式(2.5.16)中のものと全く同じであることが分かる．読者は調和振動子に対して同様の比較を行ってみるとよい．

先に，(2.5.40)中にある重みの因子 $1/w(\Delta t)$ は $V(x)$に依らないと仮定すると述べた．そこでこの因子を自由粒子に対して評価しておけばよい．ハイゼンベルク表示の位置固有ケットは，同時刻で

$$<x_n,\ t_n|\,x_{n-1},\ t_{n-1}>\Big|_{t_n=t_{n-1}}=\delta(x_n-x_{n-1}) \tag{2.5.43}$$

のように δ-関数の意味で規格直交していることに注意すると

$$\frac{1}{w\,(\Delta t)}=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\,\Delta t}} \tag{2.5.44}$$

が得られる．ここで

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\xi\exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\,\Delta t}\right)=\sqrt{\frac{2\pi i\hbar\,\Delta t}{m}} \tag{2.5.45a}$$

および

$$\lim_{\Delta t\to 0}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\,\Delta t}}\exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\,\Delta t}\right)=\delta(\xi) \tag{2.5.45b}$$

を用いた．もちろん，この重みの因子は (2.5.16) 式に表示されている自由粒子のプロパゲーターから予想されていたものである．

要約すると $\Delta t \to 0$ で

$$< x_n,\ t_n | x_{n-1},\ t_{n-1} > = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp\left[\frac{iS(n,\ n-1)}{\hbar}\right] \tag{2.5.46}$$

となることが分かった．$t_N - t_1$ が有限な場合，遷移振幅を与える最終的な表式は

$$< x_N,\ t_N | x_1,\ t_1 > = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{\frac{N-1}{2}}$$

$$\times \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \prod_{n=2}^{N} \exp\left[\frac{iS(n,\ n-1)}{\hbar}\right] \tag{2.5.47}$$

となる．上式では x_N と t_N を固定して $N\to\infty$ の極限をとる．普通よく行われるように，ここで新しい多次元の(実際は無限次元の)積分演算子を

$$\int_{x_1}^{x_N} \mathscr{D}[\,x(t)\,] \equiv \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{(N-1)/2} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \tag{2.5.48}$$

で定義し(2.5.47)を

$$< x_N,\ t_N | x_1,\ t_1 > = \int_{x_1}^{x_N} \mathscr{D}[\ x(t)\ ] \exp\left[i \int_{t_1}^{t_N} dt \frac{L_{古典}(x,\ \dot{x})}{\hbar}\right] \tag{2.5.49}$$

と書く．この表式は**ファインマンの経路積分**と呼ばれている．すべての可能な経路について和をとるというこの表式の意味は(2.5.47)から明らかであろう．

(2.5.49)を導く際に踏んだ手続は，単に一つの式を導出することを目的としたのではない．そうでなく，我々は(ファインマンは)ディラックの謎めいた言葉に触発されて，経路の概念を基に量子力学の新しい定式化を試みたのである．従来の形の量子力学から借りてきた考え方は，単に (1) 重ね合せの原

理(様々のとりうる経路からの寄与を合せるとき用いた)，(2)遷移振幅の合成の性質，および(3)$\hbar\to 0$ の極限での古典論との対応の三つのみである．

従来の理論と同じ結果を得たのは自由粒子の場合であるが，今迄行ってきたことからファインマンの理論がシュレーディンガーの波動力学と全く同等であることは明らかである．この節のしめくくりに$\langle x_N, t_N | x_1, t_1\rangle$に対するファインマンの表式が，(2.5.8)で定義されたプロパゲーターと同様 x_N, t_N を変数としたシュレーディンガーの時間に依存する方程式を，実際に満足することを証明しよう．

出発点は

$$\begin{aligned}\langle x_N, t_N | x_1, t_1\rangle &= \int dx_{N-1}\langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1}\rangle\langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\exp\left[\left(\frac{im}{2\hbar}\right)\frac{(x_N - x_{N-1})^2}{\Delta t} - \frac{iV\Delta t}{\hbar}\right] \\ &\quad\times\langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1\rangle \end{aligned} \tag{2.5.50}$$

であり，ここで $t_N - t_{N-1}$ は無限小であると仮定している．変数

$$\xi = x_N - x_{N-1} \tag{2.5.51}$$

を導入し，$x_N \to x$ および $t_N \to t+\Delta t$ とすれば

$$\begin{aligned}\langle x, t+\Delta t | x_1, t_1\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\,\exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} - \frac{iV\Delta t}{\hbar}\right) \\ \times\langle x-\xi, t | x_1, t_1\rangle \end{aligned} \tag{2.5.52}$$

が得られる．(2.5.45b)から明らかなように，$\Delta t \to 0$ の極限でこの積分への主な寄与は $\xi\simeq 0$ の領域から来る．したがって $\langle x-\xi, t | x_1, t_1\rangle$ を ξ の級数で展開することが許される．同様に $\langle x, t+\Delta t | x_1, t_1\rangle$ と $\exp(-iV\Delta t/\hbar)$ を Δt の級数で展開すると

$$\langle x, t | x_1, t_1\rangle + \Delta t\frac{\partial}{\partial t}\langle x, t | x_1, t_1\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar \Delta t}\right)\left(1 - \frac{iV\Delta t}{\hbar} + \cdots\cdots\right)$$

$$\times\left[<x, t|x_1, t_1> + \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} <x, t|x_1, t_1> + \cdots\cdots \right] \quad (2.5.53)$$

となる．ここで ξ の1次の項は，ξ に関して積分するとゼロになるので落とした．左辺の $<x, t|x_1, t_1>$ の項は，(2.5.45a)によって右辺の最大項と一致する．Δt の1次の項を集めると

$$\Delta t \frac{\partial}{\partial t} <x, t|x_1, t_1> = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \sqrt{2\pi} \left(\frac{i\hbar \Delta t}{m}\right)^{3/2} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} <x, t|x_1, t_1>$$

$$- \left(\frac{i}{\hbar}\right) \Delta t V <x, t|x_1, t_1> \quad (2.5.54)$$

が得られる．ここで，(2.5.45a)を Δt について微分して得られる

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^2 \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar \Delta t}\right) = \sqrt{2\pi} \left(\frac{i\hbar \Delta t}{m}\right)^{3/2} \quad (2.5.55)$$

を用いた．このようにすると $<x, t \mid x_1, t_1>$ がシュレーディンガーの時間に依存する波動方程式を満たすことが分かる：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} <x, t|x_1, t_1> = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} <x, t|x_1, t_1> + V <x, t|x_1, t_1>. \quad (2.5.56)$$

したがって，ファインマンの処方箋によってつくられた $<x, t|x_1, t_1>$ は，シュレーディンガーの波動力学におけるプロパゲーターと同じであるという結論を下すことができる．

　経路積分に基づくファインマンの時空的アプローチは，非相対論的量子力学の実際の問題に取り組む際にあまり便利なものではない．単純な調和振動子に対してさえ，適切な経路積分を具体的に計算するのは複雑である*．し

* ファインマンの経路積分の方法を使って，簡単な調和振動子の問題を解くよう，読者は章末の問題2.31で求められている．

かし，彼のアプローチは考え方の上で非常に満足のいくものである．物理学の理論上合理的なある一組の要請に基づいて，我々は否応なしに通常の量子力学と同等な数学形式に導かれた．微視的現象を同じようにうまく説明する，量子力学に代わる理に適った理論を作ることが一体できるのかどうかは疑問である．

経路積分に基づく方法は，場の量子論や統計力学といった現代物理学の他の分野でも，大変偉力を発揮している．この教科書では経路積分の方法は，アハラノフ・ボーム効果を議論するとき再び登場する*．

2.6 ポテンシャルとゲージ変換

一定のポテンシャル

よく知られているように古典力学では，ポテンシャルエネルギーの原点は物理的に重要でない．$\boldsymbol{x}(t)$ や $\boldsymbol{L}(t)$ といった力学変数の時間変化は，V_0 を時間的，空間的に一定とすると，$V(\boldsymbol{x})$ を用いようが $V(\boldsymbol{x})+V_0$ を用いようが同じである．ニュートンの第2法則に現れる力は，ポテンシャルの傾きのみによるから，明らかに付加定数は重要でない．これに較べて，量子力学ではどのような状況であろうか．

あるポテンシャルのもとでの状態ケットの時間的発展を，シュレーディンガー表示で見よう．$|\alpha, t_0; t\rangle$ を $V(\boldsymbol{x})$ のもとでの状態ケットとし，$\overline{|\alpha, t_0; t\rangle}$ を

$$\tilde{V}(\boldsymbol{x}) = V(\boldsymbol{x}) + V_0 \tag{2.6.1}$$

であるときの対応する状態ケットとしよう．正確を期すために，初期条件は $t = t_0$ で両方のケットとも $|\alpha\rangle$ に一致するようにしよう．二つのケットが同じ物理的場面を表すとすると，位相を適当に選ぶことによって常にそのようにで

* 経路積分の基礎と応用に興味のある読者は，Feynman and Hibbs, 1965を参照するとよい．

きる．時刻 t での状態ケットは，t_0 での状態ケットに時間的発展の演算子 $\mathscr{U}(t, t_0)$ をかけて得られることを思い出すと

$$\overline{|\alpha, t_0; t\rangle} = \exp\left[-i\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(x) + V_0\right)\frac{(t-t_0)}{\hbar}\right]|\alpha\rangle$$
$$= \exp\left[\frac{-iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right]|\alpha, t_0; t\rangle \tag{2.6.2}$$

が得られる．すなわち $\tilde{V}$ の影響下でケットを計算すると位相因子が $\exp[-iV_0(t-t_0)/\hbar]$ だけ異なる時間依存性を示す．定常状態で，ポテンシャルを $V(\boldsymbol{x})$ として計算した時間依存性が $\exp[-iE(t-t_0)/\hbar]$ であったとすると，$V(\boldsymbol{x}) + V_0$ のときの時間依存性は $\exp[-i(E+V_0)(t-t_0)/\hbar]$ となる．つまり V の代りに $\tilde{V}$ を用いるときの変化は，恐らく読者がすぐ想像したように，単に

$$E \rightarrow E + V_0 \tag{2.6.3}$$

となる．期待値 $\langle \boldsymbol{x} \rangle$ および $\langle \boldsymbol{S} \rangle$ の時間的発展といった観測にかかる効果は，いつもエネルギーの差［(2.1.47)を見よ］に依っている．期待値の正弦的時間依存性を特徴づけるボーア振動数は，我々が $V(\boldsymbol{x})$ を使おうと $V(\boldsymbol{x}) + V_0$ を使おうと，全く同じである．一般に観測量の期待値は，世の中のすべての状態に共通因子 $\exp[-iV_0(t-t_0)/\hbar]$ がかかっても全く変わりがない．

以上は明白なことに見えるかも知れないが，これが**ゲージ変換**と呼ばれる一群の変換の第一例である．今迄使っていたポテンシャルエネルギーの原点を変えて

$$V(\boldsymbol{x}) \rightarrow V(\boldsymbol{x}) + V_0 \tag{2.6.4}$$

とすると，それにつれて状態ケットを

$$|\alpha, t_0; t\rangle \rightarrow \exp\left[\frac{-iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right]|\alpha, t_0; t\rangle \tag{2.6.5}$$

だけ変えなければならない．当然この変化は，波動関数に

$$\psi(\mathbf{x}', t) \to \exp\left[\frac{-iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right]\psi(\mathbf{x}', t) \tag{2.6.6}$$

の変化をおよぼす．

つぎに空間的には一様であるが，時間依存性のある V_0 を考えよう．すると(2.6.5)との類似から

$$|\alpha, t_0; t\rangle \to \exp\left[-i\int_{t_0}^{t} dt' \frac{V_0(t')}{\hbar}\right]|\alpha, t_0; t\rangle \tag{2.6.7}$$

が容易に分かる．物理的に述べると，$V(\mathbf{x})$の代わりに $V(\mathbf{x}) + V_0(t)$ を用いるとき，我々はエネルギーの原点を時々刻々新たに選ぶのである．

ポテンシャルの絶対的尺度は任意に選べるが，ポテンシャルの差は物理的に重要であり，実際，印象深い方法で検出することができる．この点を説明するのに，図2.4にある装置を考えよう．荷電粒子線が2本に分けられ，そ

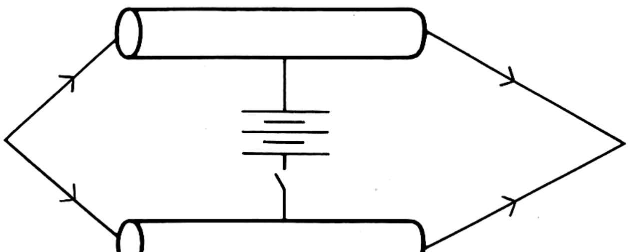


図 2.4.　ポテンシャルの差を検出する量子力学的干渉

れぞれ金属性の籠の中へ入っていく．図にあるように，スイッチを入れると二つの籠の間に有限のポテンシャルの差が保てるようにしておく．粒子線の中の粒子は，籠の大きさよりずっと小さな寸法の波束をつくっていると見なせる．波束が籠の中へ入ってきてからスイッチを入れポテンシャルの差を作り，波束が籠から出ていく前にスイッチを切ったとしよう．籠の中でポテンシャルは空

間的に一様だから粒子には力が働かない．電場がないのである．次に2本の粒子線を，図2.4の干渉領域で出会うようにしよう．ポテンシャルの存在のために，粒子線の各成分は (2.6.7) で示されるような位相の変化を受ける．その結果，干渉領域での線の強度には観測可能な干渉項が生じる．すなわち

$$\cos(\phi_1 - \phi_2), \qquad \sin(\phi_1 - \phi_2) \tag{2.6.8}$$

を含む項であり，ここで

$$\phi_1 - \phi_2 = \left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{t_i}^{t_f} dt[V_2(t) - V_1(t)] \tag{2.6.9}$$

である．つまり粒子は実際に力を受けないにも拘らず，ポテンシャル $V_2(t) - V_1(t)$ がかかったかどうかに応じて，観測可能な効果がある．この効果が純粋に量子力学的な性質であることに注目しよう．$\hbar \to 0$ の極限ではこの興味深い干渉効果は，コサインの振動が無限に早くなって打消されてしまう*.

量子力学に現われる重力

量子力学に重力の効果がどのように現われるかを，印象的に示す実験がある．それを説明する前に，古典力学ならびに量子力学における重力の役割について，一言述べておこう．

落体の古典的な運動方程式

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -m\nabla\Phi_{\text{grav}} = -mg\hat{\mathbf{z}} \tag{2.6.10}$$

を考えよう．この式から質量は消去できる．すなわち，空気抵抗がなければ，ガリレオが示したように，羽毛も石も重力の影響下で同様にふるまう．これはもちろん，重力質量と慣性質量が等しいことの直接的結果である．粒子の軌跡の方程式に質量は現われないから，古典力学での重力は，よく純粋な幾何学的理論であるといわれる．

---

* この思考実験は，この節の後で議論するアハラノフ・ボームの実験をミンコフスキー回転したものである．［訳注：この干渉効果は実際に観測されるようになった．S. Washburn *et. al., Phys. Rev. Lett.* **59**(1987), 1791.参照.］

量子力学では事情が違う．波動力学の方程式を式(2.6.10)に似た形で書くと

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2 + m\Phi_{\text{grav}}\right]\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{2.6.11}$$

である．質量はもはや打消せない．質量は $\hbar/m$ という組合せで現われるので，$\hbar$ が入る問題には m も入ると期待される．この点を見るためにファインマンの経路積分の式を落体に対して使うと，基礎になるのは

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\exp\left[i\int_{t_{n-1}}^{t_n} dt\,\frac{m\dot{x}^2/2 - mgz}{\hbar}\right],$$
$$(t_n - t_{n-1} = \Delta t \to 0) \tag{2.6.12}$$

である．ここでも m が $m/\hbar$ の組合せで入っていることが分かる．ハミルトンの古典的方法が

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} dt\left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - mgz\right) = 0 \tag{2.6.13}$$

に基づいていて，m をはじめから消すことができることに比べると，これは大きな違いである．

シュレーディンガー方程式(2.6.11)から出発して，エーレンフェストの定理

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = -g\hat{z} \tag{2.6.14}$$

を導くことができる．しかし，ここには $\hbar$ も m も現われない．重力の与える非凡な量子力学的効果を見るには，$\hbar$ があからさまに現われる効果，したがって m が現われると期待される効果を調べなくてはならない．古典力学の純粋な幾何学的現象と対比される効果である．

1975年迄，(2.6.11) 式中に $m\Phi_{\text{grav}}$ の項があることを，直接はっきり

とさせるような実験はなかった．確かに素粒子の自由落下は観測されていた．しかしその実験を説明するのに古典的運動方程式——すなわち $\hbar$ が現われないエーレンフェストの定理，(2.6.14) ——で十分であった．V．パウンドと協力者による，有名な"光子の重さ"の実験も量子領域での重力の存在を試したのでない．彼等が測ったのは，$\hbar$ が表だって現われない振動数のずれだったのである†.

微視的なスケールで重力は非常に弱く，なかなか観測できない．束縛状態の問題における重力の効果を見るのがいかに難しいか，重力で結合した電子と中性子の基底状態を考えてみよう．水素原子では電子と陽子がクーロン力で結合しているが，これに似たことを重力で考えてみるのである．距離が同じとき，電子と中性子との間の重力は，電子と陽子との間のクーロン力に較べて約 2×10^{39}分の 1 ほど弱い．その時のボーア半径は簡単に得られ

$$a_0=\frac{\hbar^2}{e^2m_e}\rightarrow\frac{\hbar^2}{G_Nm_e^2m_n} \tag{2.6.15}$$

である．ここで，G_Nはニュートンの万有引力定数である．この方程式に数値を代入すると，この重力で結合した系のボーア半径は$\sim10^{31}$cm，即ち$\sim10^{13}$光年となる．これは推定されている宇宙の半径よりも10の何乗倍も大きい！

ここで**重力がひきおこす量子的干渉**として知られている注目すべき現象を議論しよう．ほとんどエネルギーがそろった粒子線——実際には熱中性子線——を図2.5に示すように二つにわけたのち再び一つに合わせる．現実の実験では中性子線がシリコンの結晶によって分割されて屈折を受けるのだが，技巧をつくしたこのすばらしい中性子干渉計の詳細はここで問題にしない．取りうる二つの経路のつくるループの巨視的大きさに比べて，波束の大きさはずっと小さいと仮定できるから，古典的な軌跡の概念を用いることができる．はじ

---

† 訳注：R.V.Pound and G.A.Rebka, Jr., *Phys. Rev. Lett.* **4** (1960), 337. 重力ポテンシャルによる γ 線の振動数のずれ（相対論的効果）を，実験室（塔）内で測定.

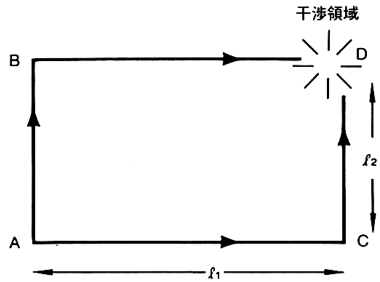


図 2.5.　重力がひきおこす量子的干渉を検出する実験

めに，経路A→B→DもA→C→Dも水平面内にあるとしよう．重力ポテンシャルの原点をどこにとるかは重要でないので，この平面内で起こるすべての現象に対して $V=0$ と置ける．すなわち，重力を全く無視することが許される．この状況は，取りうる二つの経路によって作られる平面を線分ACを軸にして δ だけ回転すると全く変わる．今度はBDの高さでのポテンシャルはACの高さでのものと較べて，$m_n g l_2 \sin\delta$ だけ大きい．これは経路BDに沿った状態ケットが“速く回転する”ことを意味する．これによってDに到達する二つの波束に，重力によってひきおこされた位相差が生じる．実際にはABやCDでも重力による位相変化が生じる．しかしこの効果は，取りうる二つの経路を比較するとき，打消しあう．正味の効果として，ABDの経路でDに達する波束は，ACDの経路を通ってDに達する波束に較べて相対的に

$$\exp\left[\frac{-im_n g l_2 \sin\delta T}{\hbar}\right] \tag{2.6.16}$$

の位相変化を受ける．ここで T は波束がBからD（あるいはAからC）に進むのにかかる時間であり，m_nは中性子の質量である．この位相差は図2.5の面を回転して調節することができる．角度 δ は0から$\pi/2$まで，あるいは0から$-\pi/2$まで変えられる．波束の運動にかかる時間 T，すなわち $l_1/v_{波束}$を，中性子のド・ブロイ波長 λ で表わすと，位相差として

$$\phi_{\mathrm{ABD}} - \phi_{\mathrm{ACD}} = -\frac{m_n^2 g l_1 l_2 \lambda \sin\delta}{\hbar^2} \tag{2.6.17}$$

という表式が得られる．このように角度δに依存する観測可能な干渉効果が予言できる．これは光学でのマイケルソン型干渉計が作る縞模様を思い出させる現象である．

表式(2.6.17)を理解するもっと波動力学的な方法を述べよう．今，時間に依らないポテンシャルを扱っているので，運動エネルギーと位置エネルギーの和は一定である:

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + mgz = E. \tag{2.6.18}$$

道筋BDと道筋ACの高さの差は，$\mathbf{p}$すなわちλのわずかの差となって現われる．その結果，λの差に起因する位相の差が積み重なった効果が生じる．この波動力学的な考え方からも，(2.6.17)の結果が出てくるのを示すのは，読者の演習問題にしておこう．

表式(2.6.17)で興味深いのは，この値が小さ過ぎも大き過ぎもしないことである．この興味ある効果を検出するのに，“机上に乗る”寸法の経路を通る熱中性子がちょうど良い．$\lambda = 1.42\mathrm{\mathring{A}}$（シリコン中の原子間距離と同程度）で$l_1 l_2 = 10\mathrm{cm}^2$とすると，$m_n^2 g l_1 l_2 \lambda/\hbar^2$は55.6になる．平面をゆっくりと90°回すとき，干渉領域Dの強さは極大・極小をくりかえすであろう．定量的に述べると，$55.6/2\pi \approx 9$回の振動が見えるに違いない．このような効果が実際，実験で観測されたことはすばらしい事である．R.コレラ，A.オーバーハウザーとS.A.ウェルナーによる1975年の実験から引用した図2.6を見よう．重力による位相のずれは誤差1%以内で確かめられたことが分かる†．

† 訳注：R. Colella, A. W. Overhauser and S. A. Werner. *Phys. Rev. Lett.* **34** (1975), 1472. 同実験グループによって，地球の自転（コリオリの力）がひきおこす干渉効果も観測されている．この効果がアハラノフ・ボーム効果（後述）と対応することは，J. J. Sakurai. *Phys. Rev. D* **21** (1980), 2993で指摘されている．

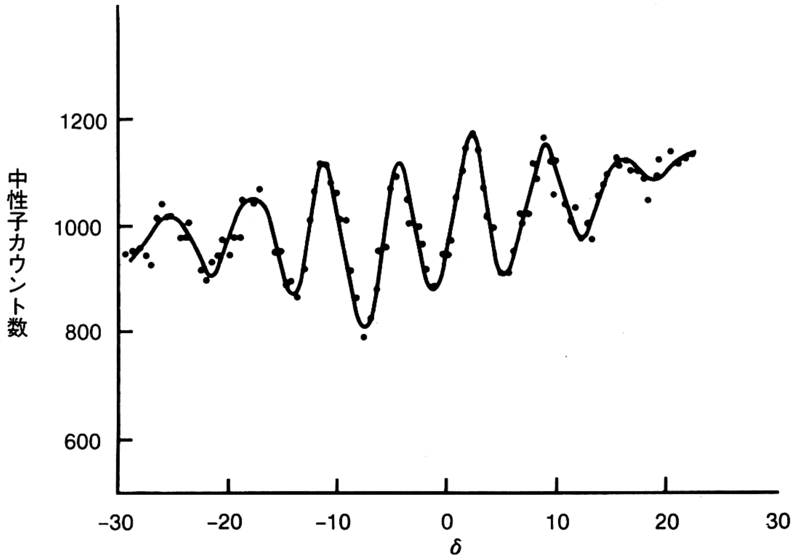


図 2.6.　重力がひきおこした位相変化の，回転角 δ 依存性

この効果が純粋に量子力学的であり，$\hbar \to 0$ とすれば，干渉模様が消えてしまうことを強調しておこう．重力ポテンシャルはシュレーディンガー方程式に，期待していたように入っていることが示された．この実験は $(m/\hbar)^2$ に依存する効果であるから，量子論のレベルでは重力が純粋に幾何学的なものではないことをも示している*.

電磁気学におけるゲージ変換

次に電磁気学に現われるポテンシャルに目を向けよう．時間に依らな

---

* しかしこれは，この種の効果を理解するのに等価原理が重要でないといっているのではない．仮に重力質量（$m_{\text{重力}}$）が慣性質量（$m_{\text{慣性}}$）と等しくなければ，$(m/\hbar)^2$ は $m_{\text{重力}} m_{\text{慣性}}/\hbar^2$ に置きかわる．$m_{\text{重力}}$ と $m_{\text{慣性}}$ を区別せずに干渉模様が正しく予想できたという事実は，量子論のレベルでの等価原理の成立を支持するものといえる．

いスカラーポテンシャルとベクトルポテンシャル，$\phi(\boldsymbol{x})$および$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$から導くことのできる電場と磁場を考える：

$$\boldsymbol{E}=-\nabla\phi, \qquad \boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}. \tag{2.6.19}$$

電磁場中にある，電荷 e（電子に対しては $e<0$）の粒子をあらわすハミルトニアンは，古典物理から

$$H=\frac{\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2}{2m}+e\phi \tag{2.6.20}$$

のようになる．量子力学ではϕと $\boldsymbol{A}$ は荷電粒子の位置演算子 $\boldsymbol{x}$ の関数である．$\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{A}$ は交換しないので(2.6.20)式を解釈する際に，少し注意がいる．最も安全な手続きは

$$\left(\boldsymbol{p}-\frac{e\boldsymbol{A}}{c}\right)^2 \rightarrow \boldsymbol{p}^2-\left(\frac{e}{c}\right)(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})+\left(\frac{e}{c}\right)^2\boldsymbol{A}^2 \tag{2.6.21}$$

と書くことである．この形でハミルトニアンは，明らかにエルミート的である．

ポテンシャル ϕ と $\boldsymbol{A}$ の影響下にある荷電粒子の運動を調べるのに，まずハイゼンベルク表示をとろう．$\boldsymbol{x}$ の時間微分は直ちに

$$\frac{dx_i}{dt}=\frac{[x_i, H]}{i\hbar}=\frac{p_i-eA_i/c}{m} \tag{2.6.22}$$

と計算できる．この式は，本書で平行移動の生成演算子として定義されている演算子 $\boldsymbol{p}$ が，$m d\boldsymbol{x}/dt$ と同じではないことを示している．しばしば $\boldsymbol{p}$ は**正準運動量**と呼ばれ，$\boldsymbol{\Pi}$と記される**力学的運動量**

$$\boldsymbol{\Pi}\equiv m\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}=\boldsymbol{p}-\frac{e\boldsymbol{A}}{c} \tag{2.6.23}$$

と区別される．正準運動量については

$$[p_i,\ p_j]=0 \tag{2.6.24}$$

が成り立つが，力学的運動量については類似した交換関係がゼロとならない．その代わり，読者が容易に確かめられるように

$$[\Pi_i,\ \Pi_j] = \left(\frac{i\hbar e}{c}\right)\varepsilon_{ijk} B_k \tag{2.6.25}$$

となる．ハミルトニアンを

$$H = \frac{\boldsymbol{\Pi}^2}{2m} + e\phi \tag{2.6.26}$$

と書き直し，基本的な交換関係を用いると，量子力学の形に表わした**ローレンツ力**の表式を導くことができる．すなわち

$$m\frac{d^2\boldsymbol{x}}{dt^2} = \frac{d\boldsymbol{\Pi}}{dt} = e\left[\boldsymbol{E} + \frac{1}{2c}\left(\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\right)\right] \tag{2.6.27}$$

である．これは $\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{B}$ とがあるときの荷電粒子に対するエーレンフェストの定理を，ハイゼンベルク表示で書いたものである．

さて ϕ と $\boldsymbol{A}$ があるときのシュレーディンガーの波動方程式を調べよう．最初になすべきことは H を $\langle\boldsymbol{x}'|$ と $|\alpha, t_0; t\rangle$ の間にはさむことである．注意を払う必要のある唯一の項は

$$\begin{aligned}
&\langle\boldsymbol{x}'|\left[\boldsymbol{p} - \frac{e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})}{c}\right]^2|\alpha, t_0; t\rangle \\
&= \left[-i\hbar\nabla' - \frac{e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')}{c}\right]\langle\boldsymbol{x}'|\left[\boldsymbol{p} - \frac{e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})}{c}\right]|\alpha, t_0; t\rangle \\
&= \left[-i\hbar\nabla' - \frac{e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')}{c}\right]\cdot\left[-i\hbar\nabla' - \frac{e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')}{c}\right]\langle\boldsymbol{x}'|\alpha, t_0; t\rangle
\end{aligned} \tag{2.6.28}$$

である．最後の行のはじめの ∇' は，$\langle\boldsymbol{x}'|\alpha, t_0; t\rangle$ と $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')$ の両方を微分できることを強調しよう．以上をまとめると

$$\frac{1}{2m}\left[-i\hbar\,\nabla' - \frac{e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')}{c}\right]\cdot\left[-i\hbar\,\nabla' - \frac{e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')}{c}\right]\langle \boldsymbol{x}'|\alpha,\, t_0\,;t\rangle$$

$$+\, e\phi(\boldsymbol{x}')\langle \boldsymbol{x}'|\alpha,\, t_0\,;t\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \boldsymbol{x}'|\alpha,\, t_0\,;t\rangle \tag{2.6.29}$$

となる．この表式から容易に連続の方程式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla'\cdot\boldsymbol{j} = 0 \tag{2.6.30}$$

が得られる．ここで以前と同じように ρ は $|\psi|^2$ であり，$\langle \boldsymbol{x}'|\alpha,\, t_0\,;t\rangle$ を ψ と書いた．一方確率の流れ $\boldsymbol{j}$ に対しては

$$\boldsymbol{j} = \left(\frac{\hbar}{m}\right)\mathrm{Im}(\psi^*\nabla'\psi) - \left(\frac{e}{mc}\right)\boldsymbol{A}|\psi|^2 \tag{2.6.31}$$

であるが，これは置き換え

$$\nabla' \rightarrow \nabla' - \left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\boldsymbol{A} \tag{2.6.32}$$

から予期される表式である．波動関数を $\sqrt{\rho}\exp(iS/\hbar)$ と書くと [(2.4.18) を見よ]，$\boldsymbol{j}$ を表わす別の形が得られる．すなわち，

$$\boldsymbol{j} = \left(\frac{\rho}{m}\right)\left(\nabla S - \frac{e\boldsymbol{A}}{c}\right) \tag{2.6.33}$$

であり，これは(2.4.20)式と比較されるべき式である．この形は超伝導や磁束の量子化などを議論する際に，便利であることが分かるであろう．また，$\boldsymbol{j}$ の空間積分が $1/m$ は別にして力学的運動量（正準運動量ではない）となることを指摘しておく：

$$\int d^3x'\boldsymbol{j} = \frac{\langle \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\rangle}{m} = \frac{\langle \boldsymbol{\Pi}\rangle}{m}. \tag{2.6.34}$$

以上をふまえて，電磁気学での**ゲージ変換**の問題を議論していこう．

はじめに，λ を定数すなわち $\boldsymbol{x}$ にも t にも依らない量として

$$\phi \rightarrow \phi + \lambda, \quad \boldsymbol{A} \rightarrow \boldsymbol{A} \tag{2.6.35}$$

を考えよう．$\boldsymbol{E}$ も $\boldsymbol{B}$ も明らかにこの変換で不変である．この変換は単にエネルギー・スケールの原点の変化に過ぎず，この節のはじめで扱った変換で単に V を $e\phi$ で置き換えればよい．この変換に伴って必要な状態ケットの変化も，既に議論したので［(2.6.5)式を見よ］，この変換に関してこれ以上言及しない．

もっと興味あるのは，変換

$$\phi \rightarrow \phi, \quad \boldsymbol{A} \rightarrow \boldsymbol{A} + \nabla \Lambda \tag{2.6.36}$$

で，ここで Λ は $\boldsymbol{x}$ の関数である．静電場 $\boldsymbol{E}$，静磁場 $\boldsymbol{B}$ は，(2.6.36)の下で不変である．(2.6.35)式も(2.6.36)式も

$$\phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad \boldsymbol{A} \rightarrow \boldsymbol{A} + \nabla \Lambda \tag{2.6.37}$$

の特別の場合であり，これは

$$\boldsymbol{E} = -\nabla \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}, \quad \boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} \tag{2.6.38}$$

で与えられる $\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{B}$ を不変に保つ．しかし以下では時間に依存する場やポテンシャルを考えない．この節でゲージ変換という言葉は (2.6.36) を指すことにする．

古典物理では，荷電粒子の軌跡といった観測可能な効果は，用いるゲージ，すなわちたまたま採用した Λ の特別な選び方に依存しない．z-方向の一様な磁場

$$\boldsymbol{B} = B\hat{z} \tag{2.6.39}$$

中にある荷電粒子を考えよう．この磁場を

$$A_x = -\frac{By}{2}, \quad A_y = \frac{Bx}{2}, \quad A_z = 0 \tag{2.6.40}$$

から導くこともできるし，同じように

$$A_x = -By, \quad A_y = 0, \quad A_z = 0 \tag{2.6.41}$$

から導くこともできる．二番目の形式は一番目から

$$\boldsymbol{A} \rightarrow \boldsymbol{A} - \nabla\left(B\frac{xy}{2}\right) \tag{2.6.42}$$

とすることによって得られるが，これはまさに(2.6.36)の形をしている．どちらの $\boldsymbol{A}$ を使おうと，初期条件を与えたときの荷電粒子の軌跡は同じで，らせんである．すなわち xy-平面に投影すると一様な円運動であり，これに z-方向の一様な直線運動が重なったものである．しかし p_x および p_y を見ると結果は非常に異なる．(2.6.41)を用いると p_x は運動の定数であるが，(2.6.40)を用いるとそうでない．

ハミルトンの運動方程式

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \frac{dp_y}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial y}, \quad \cdots \tag{2.6.43}$$

を思い出そう．一般に，正準運動量はゲージ不変量でない．その数値は，同じ物理的場面を扱っていても用いる特定のゲージに依存する．これに対して，粒子の軌跡を描く力学的運動量，$\boldsymbol{\Pi}$ すなわち $m d\boldsymbol{x}/dt$ はゲージ不変であることがはっきりと確かめられる．$\boldsymbol{p}$ と $m d\boldsymbol{x}/dt$ とは(2.6.23)を通じて関連しているので，$\boldsymbol{A}$ が(2.6.42)で与えられるように変化したら，これを打ち消すように $\boldsymbol{p}$ も変化しなければならない．

ここで量子力学に戻ろう．量子力学での期待値が，ゲージ変換の下で対応する古典量と同様にふるまうと要請するのは正当であろう．すると $\langle \boldsymbol{x} \rangle$ や $\langle \boldsymbol{\Pi} \rangle$ はゲージ変換で変化しないが，$\langle \boldsymbol{p} \rangle$ は変化すると期待される．

$\boldsymbol{A}$ が存在するときの状態ケットを $|\alpha\rangle$ と記そう．同じ物理的状況をあらわす状態ケットを，$\boldsymbol{A}$ の代わりに

$$\tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{A} + \nabla \Lambda \tag{2.6.44}$$

を使うとき，$|\tilde{\alpha}>$ と記す．ここで Λ は，$\boldsymbol{A}$ と同様，位置演算子 $\boldsymbol{x}$ の関数である．我々の基本的要請は

$$<\alpha|\boldsymbol{x}|\alpha> = <\tilde{\alpha}|\boldsymbol{x}|\tilde{\alpha}> \tag{2.6.45a}$$

および

$$<\alpha|\left(\boldsymbol{p} - \frac{e\boldsymbol{A}}{c}\right)|\alpha> = <\tilde{\alpha}|\boldsymbol{p} - \frac{e\tilde{\boldsymbol{A}}}{c}|\tilde{\alpha}> \tag{2.6.45b}$$

である．これに加えて状態ケットのノルムの保存を，いつものように要請する：

$$<\alpha|\alpha> = <\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}>. \tag{2.6.46}$$

$|\tilde{\alpha}>$ を $|\alpha>$ に関係づける演算子 $\mathscr{G}$ を作らなければならない：

$$|\tilde{\alpha}> = \mathscr{G}|\alpha>. \tag{2.6.47}$$

不変的性質（2.6.45a）および（2.6.45b）は

$$\mathscr{G}^\dagger \boldsymbol{x} \mathscr{G} = \boldsymbol{x} \tag{2.6.48a}$$

および

$$\mathscr{G}^\dagger\left(\boldsymbol{p} - \frac{e\boldsymbol{A}}{c} - \frac{e\nabla\Lambda}{c}\right)\mathscr{G} = \boldsymbol{p} - \frac{e\boldsymbol{A}}{c} \tag{2.6.48b}$$

であれば保証される．この役割を果たす $\mathscr{G}$ は

$$\mathscr{G} = \exp\left[\frac{ie\Lambda(\boldsymbol{x})}{\hbar c}\right] \tag{2.6.49}$$

である．まず $\mathscr{G}$ はユニタリー的であるから，(2.6.46) を満足する．次に，$\boldsymbol{x}$

は $\boldsymbol{x}$ の任意の関数と交換するので，(2.6.48a) も明らかに満足する．(2.6.48b) については

$$\exp\left[\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right]\boldsymbol{p}\exp\left[\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right]=\exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right)\left[\boldsymbol{p},\exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right)\right]+\boldsymbol{p}$$
$$=-\exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right)i\hbar\nabla\exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right)+\boldsymbol{p}$$
$$=\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\nabla\Lambda \qquad (2.6.50)$$

となることを指摘しておこう．ここで(2.2.23b)式を用いた．

ゲージ変換の下での量子力学の不変性は，直接シュレーディンガー方程式を調べることによっても示すことができる．$|\alpha, t_0; t\rangle$を，$\boldsymbol{A}$ が存在するときのシュレーディンガー方程式の解としよう：

$$\left[\frac{(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c)^2}{2m}+e\phi\right]|\alpha, t_0; t\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t_0; t\rangle. \qquad (2.6.51)$$

$\tilde{\boldsymbol{A}}$ が存在する場合の対応する解は

$$\left[\frac{(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c-e\nabla\Lambda/c)^2}{2m}+e\phi\right]\overline{|\alpha, t_0; t\rangle}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\overline{|\alpha, t_0; t\rangle} \qquad (2.6.52)$$

を満たさなければならない．ここで新しいケットを，(2.6.49)に合わせて

$$\overline{|\alpha, t_0; t\rangle}=\exp\left(\frac{ie\Lambda(\boldsymbol{x})}{\hbar c}\right)|\alpha, t_0; t\rangle \qquad (2.6.53)$$

と取ると，新しいシュレーディンガー方程式(2.6.52) が満足されることが分かる．この証明には，(2.6.50) を二度使うと導ける等式

$$\exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right)\left(\boldsymbol{p}-\frac{e\boldsymbol{A}}{c}-\frac{e\nabla\Lambda}{c}\right)^2\exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right)=\left(\boldsymbol{p}-\frac{e\boldsymbol{A}}{c}\right)^2 \qquad (2.6.54)$$

に気がつけばよい．

方程式 (2.6.53) はまた，対応する二つの波動関数が

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{x}', t) = \exp\left[\frac{ie\Lambda(\boldsymbol{x}')}{\hbar c}\right]\psi(\boldsymbol{x}', t) \qquad (2.6.55)$$

で結びついていることを意味している．ここで $\Lambda(x')$ は位置ベクトルの固有値である $\boldsymbol{x}'$ の実関数である．もちろんこれは，$\boldsymbol{A}$ を $\boldsymbol{A}+\nabla\Lambda$ に置き代えたシュレーディンガー方程式に (2.6.55) を直接代入して，確かめることができる．ρ と S については，ρ は不変であるが S は

$$S \to S + \frac{e\Lambda}{c} \qquad (2.6.56)$$

のように修正される．この表式は(2.6.33)で与えられる確率の流れをゲージ不変にするので，大変都合がよい．

要約すると，同じ物理的状況で異なるゲージのベクトルポテンシャルを使ったとき，対応する状態ケット（ないし波動関数）は必然的に互いに異なるものでなければならない．しかし，簡単な変化が必要なだけである．$\boldsymbol{A}$ で特徴づけられるゲージから $\boldsymbol{A}+\nabla\Lambda$ で特徴づけられる他のゲージに移るときは，単にもとのケット（ないしもとの波動関数）に $\exp[ie\Lambda(\boldsymbol{x})/\hbar c]$（ないし $\exp[ie\Lambda(\boldsymbol{x}')/\hbar c]$）をかければよい．平行移動の生成演算子として定義される**正準運動量**は明らかにゲージに依存し，その期待値は選んだ特定のゲージに依るが，**力学的運動量**や確率の流れはゲージ不変である．

読者は (2.6.49) で書かれる変換の下での不変性が，なぜゲージ不変性と呼ばれるのか，疑問に思われるであろう．この言葉はドイツ語の Eichinvarianz の訳で，Eich がゲージ(gauge 標準規)を意味する．この術語の由来にまつわる，歴史的逸話がある．

場所 $\boldsymbol{x}$ で，位置の関数 $F(\boldsymbol{x})$を考えよう．近傍の点では明らかに

$$F(\boldsymbol{x} + d\boldsymbol{x}) \simeq F(\boldsymbol{x}) + (\nabla F)\cdot d\boldsymbol{x} \qquad (2.6.57)$$

が成り立つ．しかしここで $\boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{x}+d\boldsymbol{x}$ に移る際に，次のような F を測る

尺度の変更をしたと考えよう：

$$1|_x \to [1 + \boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{x}) \cdot d\boldsymbol{x}]_{x+dx} \tag{2.6.58}$$

すると(2.6.57)ではなくて $F(\boldsymbol{x})$ を次のように測り直さなくてはならない：

$$F(\boldsymbol{x}+d\boldsymbol{x})|_{\text{rescaled}} \simeq F(\boldsymbol{x}) + [(\boldsymbol{\nabla} + \boldsymbol{\Sigma})F] \cdot d\boldsymbol{x}. \tag{2.6.59}$$

この組合せ $\boldsymbol{\nabla} + \boldsymbol{\Sigma}$ は，(2.6.32)で出会ったゲージ不変の組合せ

$$\boldsymbol{\nabla} - \left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\boldsymbol{A} \tag{2.6.60}$$

に似ているが，i がついていない．歴史を振り返ると，H．ワイルは (2.6.58) および (2.6.59) の中の尺度関数 $\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{x})$ をベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ そのものと同一であるとして，Eichinvarianz に基づいた電磁気学の幾何学的理論を構成しようとしたが成功しなかった．量子力学が誕生してから，V．フォックとF．ロンドンはゲージ不変な組合せ(2.6.60)の重要性を認識した．彼等は $\boldsymbol{\Sigma}$ を i のかかった $\boldsymbol{A}$ と比較して，ワイルの初期の仕事を復活させた．(2.6.58) と類似した量子力学の式

$$1|_x \to \left[1 - \left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\boldsymbol{A} \cdot d\boldsymbol{x}\right]_{x+dx} \tag{2.6.61}$$

は実は“尺度の変更”ではなく“位相の変更”に対応するものであるが，我々はゲージ不変という用語を依然として使っている．

アハラノフ・ボーム効果

量子力学ではベクトルポテンシャルを用いることにより，影響の大きな結果が多く得られる．そのいくつかを今から議論しよう．比較的地味そうに見える問題からはじめよう．

図2.7aに示すような中空の円筒殻を考えよう．電荷 e の一個の粒子を，堅い壁で囲まれた円筒殻の内部に完全に閉じこめたと仮定する．波動関数は内

側の壁（$\rho=\rho_a$），外側の壁（$\rho=\rho_b$）および上面と底面でゼロになるものとする．このエネルギー固有値を求めるのは，数理物理の単純な境界値問題である．

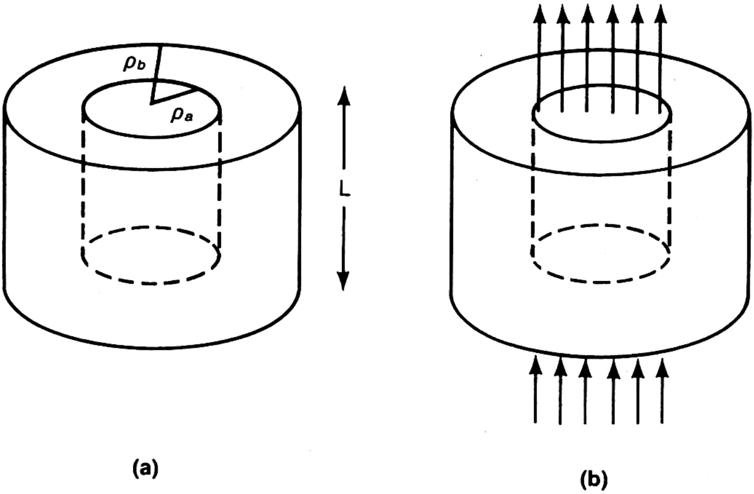


図 2.7. 中空の円筒殻，(a) 磁場なし，(b) 均一な磁場あり

次に図2.7bに示すように，円筒殻が均一な磁場を囲むようにした配置を考えよう．具体的には中央の穴の中に非常に長いソレノイドを置き，$\rho>\rho_a$ の領域に磁場が洩れないようにセットしたと考えてよい．波動関数の境界条件は，以前と同じに取る．壁はやはり堅いと仮定する．直観的に，エネルギー・スペクトルは変化しないと推測するかも知れない．円筒殻の内部に捕えられた荷電粒子は，$\boldsymbol{B}\neq 0$ の領域に全く入れないからである．しかし量子力学によれば，この推論は正しくない．

内部で磁場が消えているにしても，そこでベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ はゼロでない．ストークスの定理を用いると，磁場 $\boldsymbol{B}(=B\hat{\boldsymbol{z}})$ を作るのに必要なベクトルポテンシャルは

$$\boldsymbol{A}=\left(\frac{B\rho_a{}^2}{2\rho}\right)\hat{\boldsymbol{\phi}} \tag{2.6.62}$$

と推定できる．ここで$\hat{\boldsymbol{\phi}}$は，方位角ϕの増す方向を向いた単位ベクトルである．この新しい問題のエネルギー固有値を求めるために，シュレーディンガー方程式を解こうとするとき，必要なのはただグラジエント∇を$\nabla-(ie/\hbar c)\boldsymbol{A}$で置き換えることである．これは円筒座標系で$\phi$に関する偏微分を

$$\frac{\partial}{\partial\phi}\rightarrow\frac{\partial}{\partial\phi}-\left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\frac{B\rho_a^2}{2} \tag{2.6.63}$$

で置き換えれば達成できる．円筒座標系でグラジエントの表式が

$$\nabla=\hat{\boldsymbol{\rho}}\frac{\partial}{\partial\rho}+\hat{\boldsymbol{z}}\frac{\partial}{\partial z}+\hat{\boldsymbol{\phi}}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{2.6.64}$$

であることを思い出せばよい．置換(2.6.63)がエネルギー・スペクトルに観測可能な変化をもたらすことを，読者は具体的に確かめられるであろう．粒子は全く磁場に“触れて”いないのであるから，これは全く驚くべきことである．この問題で粒子の感じるローレンツ力は恒等的にゼロである．それにも拘らず，粒子の立入れない穴の領域で磁場が有限かどうかに，エネルギーレベルが依るのである．

今とり扱ったのは，普通アハラノフ・ボーム効果*といわれる現象を束縛状態に関して述べたものである．次にアハラノフ・ボーム効果そのものを，もとの形で議論しよう．図2.8に示すように，紙面に垂直な非常に長い侵入できない円筒の上下を通る，電荷eの一個の粒子を考えよう．円筒の内側には円筒軸と平行して磁場がある．したがって上下の粒子の経路は磁束を囲む．我々の目標は，干渉領域Bで粒子を見出す確率が，どのように磁束に依存するかをしらべることにある．

この問題は$\boldsymbol{B}$のある場合とない場合のシュレーディンガー方程式の解を比較して攻略することもできるが，教育的見地からむしろ，ファインマン

* Y.Aharonov と D.Bohm の書いた1959年の論文による．本質的に同じ効果が，これより10年以前，W.Ehrenberg と R.E.Siday によって議論されていた．

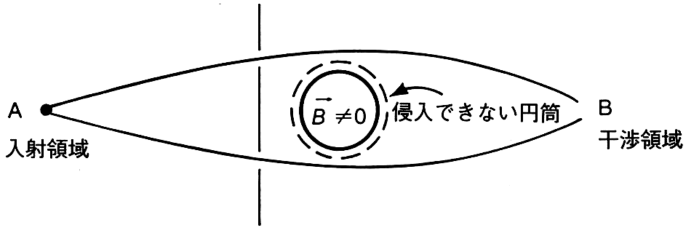


図 2.8. アハラノフ・ボーム効果

の経路積分の方法を用いる．$\boldsymbol{x}_1$と$\boldsymbol{x}_N$をそれぞれ粒子の入射領域Aと干渉領域Bの代表点とする．古典力学で磁場のあるときのラグランジアンは，磁場のないときのラグランジアン—$L^{(0)}_{古典的}$と記す—から

$$L^{(0)}_{古典的}=\frac{m}{2}\left(\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\right)^2 \rightarrow L^{(0)}_{古典的}+\frac{e}{c}\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\cdot\boldsymbol{A} \qquad (2.6.65)$$

のようにして得られることを思い出そう．これに対応する，($\boldsymbol{x}_{n-1}$, t_{n-1}) から ($\boldsymbol{x}_n$, t_n) に至るある決まった経路での作用量の変化は，このとき

$$S^{(0)}(n,\ n-1) \rightarrow S^{(0)}(n,\ n-1)+\frac{e}{c}\int_{t_{n-1}}^{t_n}dt\left(\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\right)\cdot\boldsymbol{A} \qquad (2.6.66)$$

で与えられる．最後の項の積分は

$$\frac{e}{c}\int_{t_{n-1}}^{t_n}dt\left(\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\right)\cdot\boldsymbol{A}=\frac{e}{c}\int_{\boldsymbol{x}_{n-1}}^{\boldsymbol{x}_n}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s} \qquad (2.6.67)$$

のように書ける．ここで $d\boldsymbol{s}$ は経路の断片に沿った微小線要素である．そこで $\boldsymbol{x}_1$ から $\boldsymbol{x}_N$ までの全体の寄与を考えると，次のような変化が得られる．

$$\prod_{n=2}^{N}\exp\left[\frac{iS^{(0)}(n,\ n-1)}{\hbar}\right] \rightarrow \left\{\prod\exp\left[\frac{iS^{(0)}(n,\ n-1)}{\hbar}\right]\right\}$$
$$\times\exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\int_{\boldsymbol{x}_1}^{\boldsymbol{x}_N}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s}\right) \qquad (2.6.68)$$

以上はすべて，一つの特別な経路，例えば円筒の上部を通る一つの経路についてである．我々はさらにすべての経路について和を取らなければならない．これは恐ろしく大変な仕事に見えるかもしれない．幸いにして電磁気の理論により，線積分 $\int \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s}$ は経路によらないこと，すなわち一対の異なる経路が作る輪が磁束を取り囲まない限り，この線積分が終点にのみ依存することを知っている．その結果，円筒の上部を通るすべての経路への $\boldsymbol{A} \neq 0$ による寄与は，共通の位相因子になる．同じように，円筒の下方を通るすべての経路からの寄与には，別の共通の位相因子がかかる．経路積分の記号を使うと，すべての遷移振幅に対して

$$\int_{上}\mathscr{D}[\boldsymbol{x}(t)]\exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right]+\int_{下}\mathscr{D}[\boldsymbol{x}(t)]\exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right]$$
$$\to \int_{上}\mathscr{D}[\boldsymbol{x}(t)]\exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right]\left\{\exp\left[\left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\int_{x_1}^{x_N}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s}\right]_{上}\right\}$$
$$+\int_{下}\mathscr{D}[\boldsymbol{x}(t)]\exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right]\left\{\exp\left[\left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\int_{x_1}^{x_N}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s}\right]_{下}\right\} \qquad (2.6.69)$$

が得られる．干渉領域Bで粒子を見出す確率は，全遷移振幅の絶対値の2乗に比例するので，上方および下方を通る経路が寄与する位相の差に依存する．$\boldsymbol{B}$ が存在することに起因する位相差は，ちょうど

$$\left[\frac{e}{\hbar c}\int_{x_1}^{x_N}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s}\right]_{上}-\left[\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\int_{x_1}^{x_N}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s}\right]_{下}=\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\oint \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s}$$
$$=\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\Phi_B \qquad (2.6.70)$$

である．ここで Φ_B は粒子が侵入することのできない円筒の内側にある磁束である．したがって磁場の強度を変えると，領域Bに粒子を見出す確率に正弦的変化が生じ，その周期は磁束の基本単位

$$\frac{2\pi\hbar c}{|e|}=4.135\times 10^{-7}\,\text{Gauss-cm}^2 \qquad (2.6.71)$$

である[†].

ここで議論した干渉効果は，全く量子力学的なものであることを強調しよう．古典論では，荷電粒子の運動はもっぱらニュートンの第2法則とローレンツ力の法則から決定される．ここでも以前の束縛状態の問題と同じように，粒子は $\boldsymbol{B}$ が有限な領域に決して入ることができない．粒子の波動関数が有限なあらゆる領域で，ローレンツ力は恒等的にゼロである．それでも，侵入することのできない円筒の内側に磁場があるかないかに依存する，顕著な干渉模様ができる．このことからある人達は，量子力学で基本的なのは $\boldsymbol{B}$ でなくて $\boldsymbol{A}$ であると結論するようになった．しかし，二つの例における観測可能な効果は，Φ_B のみに依存していて，Φ_B は $\boldsymbol{B}$ を用いて直接表されるということを注意しておきたい．アハラノフ・ボーム効果の検証実験は，磁化した鉄のウィスカーと呼ばれる細いフィラメントを用いて実行された[*].

磁気単極子

実験的に未だ確認されていないが，量子物理の予言するもっとも著しい事象をこの節の終りに取り上げよう．目ざとい学生は古典電磁気学を学んだときに，$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{B}$ の間には密接な対称性があるが，電荷に対応する磁荷——ふつう**磁気単極子**という——は奇妙なことにマックスウェル方程式に現われないという事実に驚いたであろう．自然界で観察される磁場の源は，運動する電荷か静止した磁気双極子であり，静止した磁荷では決してない．マックスウェル方程式を普通に書くと

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 4\pi\rho_M \tag{2.6.72}$$

† 訳注：超伝導ではこの値の二分の一を単位にして磁束の量子化が起こるので，$2\pi\hbar c/2|e|$ を磁束量子と呼ぶ．

* 最近の実験の一つは，外村彰らの実験，A. Tonomura et al. *Phys. Rev. Lett.* **48** (1982)，1443．である．［訳注：A. Tonomura. *Rev. Mod. Phys.* **59** (1987)，639．には，電子線ホログラフィーを用いたアハラノフ・ボーム効果の検出と応用に関して，その後の発展が述べられている．］

という

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 4\pi\rho \tag{2.6.73}$$

に対応した式はなく，$\nabla \cdot \boldsymbol{B}$ はゼロである．量子力学は磁気単極子が必ず存在すると予言するのではない．しかし，自然界にもし磁気単極子が見つかったとすると，これから示すように磁荷の大きさが e，$\hbar$ および c を用いて量子化されていなければならないことを，あいまいさなしに要求する．

点電荷に似た，強さ e_M の点状の磁気単極子が，原点にあるとしよう．静磁場はこのとき

$$\boldsymbol{B} = \left(\frac{e_M}{r^2}\right)\hat{\boldsymbol{r}} \tag{2.6.74}$$

で与えられる．静磁場(2.6.74)は一見すると

$$\boldsymbol{A} = \left[\frac{e_M(1-\cos\theta)}{r\sin\theta}\right]\hat{\boldsymbol{\phi}} \tag{2.6.75}$$

から導けるように見える．球座標での回転(curl)の表現

$$\begin{aligned}\nabla \times \boldsymbol{A} = \hat{\boldsymbol{r}}&\left[\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(A_\phi\sin\theta) - \frac{\partial A_\theta}{\partial\phi}\right] \\ &+ \hat{\boldsymbol{\theta}}\frac{1}{r}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial A_r}{\partial\phi} - \frac{\partial}{\partial r}(rA_\phi)\right] \\ &+ \hat{\boldsymbol{\phi}}\frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}(rA_\theta) - \frac{\partial A_r}{\partial\theta}\right]\end{aligned} \tag{2.6.76}$$

を思い出せ．しかしベクトルポテンシャル(2.6.75)には，一つの困難がある――z 軸の負の方向（$\theta=\pi$）で特異的なのである．実際この問題で，どこにも特異性がないポテンシャルを作るのは不可能であることが分かる．これを示すために，磁気単極子が置かれた原点を囲む任意の境界面に関して，“ガウスの法則”

$$\int_{\text{閉曲面}} \boldsymbol{B} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = 4\pi e_M \tag{2.6.77}$$

が成り立つことに着目しよう．一方もし $\boldsymbol{A}$ が特異的でなかったとすると，あらゆる所で

$$\nabla \cdot (\nabla \times \boldsymbol{A}) = 0 \tag{2.6.78}$$

となるだろう．すると

$$\int_{\text{閉曲面}} \boldsymbol{B} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = \int_{\text{内部体積}} \nabla \cdot (\nabla \times \boldsymbol{A}) d^3x = 0 \tag{2.6.79}$$

となり，(2.6.77)と矛盾する．

しかし，ベクトルポテンシャルは単に $\boldsymbol{B}$ を得るための手段であるから，$\boldsymbol{A}$ を表わすのにあらゆる場所で成り立つ単一の表現に限る必要はないという議論もできよう．仮に一対のポテンシャルを

$$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{I})} = \left[\frac{e_M(1-\cos\theta)}{r\sin\theta}\right]\hat{\boldsymbol{\phi}}, \quad (\theta < \pi - \varepsilon) \tag{2.6.80a}$$

$$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{II})} = -\left[\frac{e_M(1+\cos\theta)}{r\sin\theta}\right]\hat{\boldsymbol{\phi}}, \quad (\theta > \varepsilon) \tag{2.6.80b}$$

のように作ったとしよう．ポテンシャル $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{I})}$ は z- 軸の負の方向のまわりの $\theta=\pi-\varepsilon$ で定義された円錐の内側を除いて，あらゆる場所で用いることができる．同様にポテンシャル $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{II})}$ は，z 軸の正の方向のまわりの $\theta=\varepsilon$ の円錐の内側を除いて，あらゆる場所で用いられる．図2.9を見よ．これらを合わせると，あらゆる場所で有効な $\boldsymbol{B}$ の正しい表現が得られる*．

ここで，重なっている領域 $\varepsilon<\theta<\pi-\varepsilon$ で何が起こるかを考えよう．この領域では，$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{I})}$ と $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{II})}$ のどちらを使ってもよい．この二つのポテンシャルは同じ磁場を与えるので，互いにゲージ変換で結びついていなければならない．この問題に適した Λ を見出すのに，まず

* この問題を扱うもう一つの方法として，あらゆる場所で $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{I})}$ を用いながら，**ディラックの弦**と呼ばれる z-軸の負の方向に沿っての弦状の特異性に，特別の注意を払う方法がある．

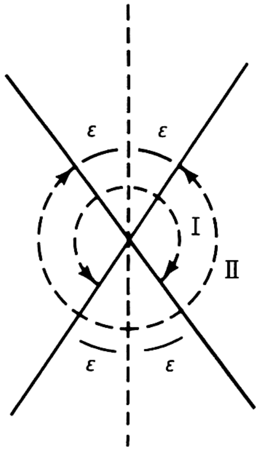


図 2.9.　ポテンシャル $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{I})}$ および $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{II})}$ の有効領域

$$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{II})}-\boldsymbol{A}^{(\mathrm{I})}=-\left(\frac{2e_M}{r\sin\theta}\right)\hat{\boldsymbol{\phi}} \tag{2.6.81}$$

に注目する．グラジエントの球座標表示が

$$\nabla\Lambda=\hat{\boldsymbol{r}}\frac{\partial\Lambda}{\partial \boldsymbol{r}}+\hat{\boldsymbol{\theta}}\frac{1}{r}\frac{\partial\Lambda}{\partial\theta}+\hat{\boldsymbol{\phi}}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\Lambda}{\partial\phi} \tag{2.6.82}$$

であることを思い出すと

$$\Lambda=-2e_M\phi \tag{2.6.83}$$

とすればよいことが結論できる．

次に磁場(2.6.74)の中にある，電荷 e の荷電粒子の波動関数を考えよう．前に強調したように，波動関数の形は用いるゲージによる．$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{I})}$ と $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{II})}$ のどちらを使ってもよい重なった領域では，対応する波動関数は(2.6.55)によって互いに

$$\psi^{(\mathrm{II})}=\exp\left(\frac{-2iee_M\phi}{\hbar c}\right)\psi^{(\mathrm{I})} \tag{2.6.84}$$

によって結びついている．ある決まったゲージを選んだ以上，状態ケットの位置固有ケットによる展開はユニークでなければならないから，波動関数 $\psi^{(\mathrm{I})}$ と $\psi^{(\mathrm{II})}$ はそれぞれ一価でなければならない．くり返し強調しているように，波動関数とは結局，状態ケットの位置固有ケットに関する展開係数に過ぎないのである．

ここで波動関数 $\psi^{(\mathrm{II})}$ のふるまいを，赤道上 $\theta=\pi/2$ で半径 r をある決まった値にとって調べよう．赤道に沿って方位角 ϕ を 0 から 2π まで増し一周したとき，それぞれ一価である $\psi^{(\mathrm{II})}$ と $\psi^{(\mathrm{I})}$ は同じ値に戻ってこなければならない．(2.6.84)式によるとこれを可能にするのは

$$\frac{2ee_M}{\hbar c}=N\ ,\qquad N=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots \tag{2.6.85}$$

のときに限る．こうして非常に影響の大きな結論にたどりつく．すなわち磁気単極子の磁荷は

$$\frac{\hbar c}{2|e|}\simeq\frac{137}{2}|e| \tag{2.6.86}$$

を単位に量子化していなければならない．

可能な最小の磁荷は，e を電子の電荷として $\hbar c/2|e|$ である．ひとたび磁気単極子の存在を仮定すると，(2.6.85)をいわば逆に用いてなぜ電荷が量子化しているのか，例えばなぜ陽子の電荷が $|e|$ の0.999972倍とならないのかを説明できて面白い*．

もう一度繰り返すが，量子力学は磁気単極子の存在を要求してはいない．しかし，もし自然界に単極子が見つかったならば，その磁荷は $\hbar c/2|e|$ を単位として量子化していなければならないことを，明確に予言する．量子力学における磁荷の量子化は，1931年 P.A.M.ディラックによってはじめて示された．ここで与えた導出はT.T. ウーとC.N.ヤンによるものである．

* 電子の電荷と陽子の電荷の大きさが等しいことは，経験的に 10^{19} 分の 4 までの精度で確立している．

問　題

1．本文で議論したスピンの歳差運動の問題を考える．これはハイゼンベルク表示によっても，解くことができる．ハミルトニアン

$$H = -\left(\frac{eB}{mc}\right)S_z = \omega S_z$$

を用いて，時間に依存する演算子 $S_x(t)$, $S_y(t)$ および $S_z(t)$ に対するハイゼンベルクの運動方程式を書け．これらの方程式を解いて，$S_{x,y,z}$ を時間の関数として求めよ．

2．第1章の問題11のハミルトニアンを，もう一度検討しよう．タイピストが誤って H を

$$H = H_{11}|1\rangle\langle 1| + H_{22}|2\rangle\langle 2| + H_{12}|1\rangle\langle 2|$$

と書いたとしよう．これは何の原理に抵触しているか．このような正しくないハミルトニアンを用いて，時間に依存する問題を最も一般的に解こうとするとき，生じる具体的な問題点を説明せよ．（簡単のために $H_{11} = H_{22} = 0$ と仮定してよい．）

3．一個の電子が，z-軸の正方向の強さ B の一様な定常的磁場中にあるとする．この電子は $t=0$ で，固有値 $\hbar/2$を持つ $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ の固有状態にあった．ここで $\hat{\mathbf{n}}$ は単位ベクトルで，xz-平面内にあり z-軸と β の角度をなしている．

a．電子を $S_x = \hbar/2$の状態に見出す確率を時間の関数として求めよ．

b．S_x の期待値を時間の関数として求めよ．

c．確認のために極端な場合，(i) $\beta\rightarrow 0$，および (ii) $\beta\rightarrow\pi/2$ に物理的

に意味のある答となっていることを示せ.

4．１次元の自由粒子の位置座標演算子を，ハイゼンベルク表示で $x(t)$ とする.

$$[x(t),\ x(0)]$$

を計算せよ.

5．ハミルトニアンが

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$$

で与えられる１次元の１粒子を考える. $[[H, x], x]$ を計算することにより

$$\sum_{a'}|\langle a''|x|a'\rangle|^2(E_{a'}-E_{a''})=\frac{\hbar^2}{2m}$$

であることを証明せよ. ここで $|a'\rangle$ は固有値 $E_{a'}$ のエネルギーの固有ケットである.

6．ハミルトニアンが

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{x})$$

で与えられる３次元空間内の１粒子を考察する. $[\ \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p},\ H]$ を計算することによって

$$\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}\rangle=\left\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{m}\right\rangle-\langle\boldsymbol{x}\cdot\nabla V\rangle$$

を示せ. 上の関係式がビリアル定理の量子力学的類似式であると同定するには，左辺がゼロになることが重要である. このようなことが起こるのは，

どのような場合か.

7．1次元空間内の自由粒子の波束を考える．これは $t=0$ で最小不確定関係

$$<(\Delta x)^2><(\Delta p)^2> = \frac{\hbar^2}{4} \qquad (t=0)$$

を満たしていたとする．さらに

$$<x> = <p> = 0 \qquad (t=0)$$

であることも分かっている．$<(\Delta x)^2>_{t=0}$ が与えられたとき，ハイゼンベルク表示を用い，$<(\Delta x)^2>_t$ を $t\,(t\geq 0)$ の関数として求めよ．（ヒント：第1章の問題18で調べた，最小不確定関係を満たす波束の性質を利用せよ.）

8．$|a'>$ と $|a''>$ をエルミート演算子 A の固有状態とし，それぞれの固有値を a'，a''（$a'\neq a''$）とする．ハミルトン演算子は，δ を実数として

$$H = |a'>\delta<a''| + |a''>\delta<a'|$$

で与えられている.

a．明らかに，$|a'>$，$|a''>$ はハミルトニアンの固有状態ではない．ハミルトニアンの固有状態を書き下せ．エネルギー固有値はいくらか.

b．系が $t=0$ で状態 $|a'>$ にあったとする．状態ベクトルを $t>0$ に対し，シュレーディンガー表示で表わせ.

c．系が $t=0$ で状態 $|a'>$ にあったとすると，$t>0$ で系を $|a''>$ の状態に見出す確率はいくらか.

d．この問題に対応する物理的状況を考えることができるか.

9．1個の粒子を入れた箱が，薄い隔壁で左右の部屋に分けられている．粒子が確実に右（または左）側にいることが分かっているとき，状態を位置固有ケット $|R>$（または $|L>$）で表わすことにする．ここで粒子が半分の

箱の中のどこにいるかは問題にしない．このときもっとも一般的な状態ベクトルは

$$|\alpha\rangle = |R\rangle\langle R|\alpha\rangle + |L\rangle\langle L|\alpha\rangle$$

のように表わされる．$\langle R|a\rangle$と$\langle L|a\rangle$ は“波動関数”とみなすことができる．粒子は隔壁を通ってトンネル運動することができるとし，このトンネル効果をハミルトニアン

$$H = \Delta(|L\rangle\langle R| + |R\rangle\langle L|)$$

で記述する．ここでΔはエネルギーの次元を持った実数である．

a．規格化されたエネルギー固有ケットを見出せ．対応するエネルギー固有値はいくらか．

b．シュレーディンガー表示では基底ケット$|R\rangle$および$|L\rangle$は固定されていて，状態ベクトルが時間変化する．系が $t=0$ で上述の$|\alpha\rangle$によって表わされていたとする．$|\alpha\rangle$に適当な時間的発展の演算子をかけることにより，$t>0$ に対して状態ベクトル$|\alpha, t_0=0\,;t\rangle$を見出せ．

c．$t=0$ で粒子が確かに右側にいたとせよ．粒子を左側で観測する確率は，時間の関数としてどうなるか．

d．波動関数$\langle R|\alpha, t_0=0\,;t\rangle$および$\langle L|\alpha, t_0=0\,;t\rangle$に対する連立シュレーディンガー方程式を書け．この連立シュレーディンガー方程式の解は，(b)から求められるものと同じであることを示せ．

e．印刷屋がミスをしてHを

$$H = \Delta|L\rangle\langle R|$$

と書いたとしよう．このハミルトニアンで時間的発展する問題をもっとも一般的に解き，確率の保存が破られていることを示せ．

10.　1次元の調和振動子を例として用い，ハイゼンベルク表示とシュレーディンガー表示の差を説明せよ．特に (a) 力学変数 x および p が，(b) もっ

とも一般的な状態ベクトルが，この二つの表示のそれぞれでどのように時間的発展をするか議論せよ．

11.　1次元調和振動子のポテンシャル中にある1粒子を考察する．$t=0$ で状態ベクトルが

$$\exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right)|0>$$

のように与えられたとする．ここで p は運動量演算子であり，a は長さの次元を持つある量である．ハイゼンベルク表示を用いて，期待値 $<x>$ を $t\geq 0$ に対して計算せよ．

12.　a．問11で，$t=0$ で指定した状態に対して，位置座標空間における波動関数を書け．次式

$$<x'|0> = \pi^{-1/4}x_0^{-1/2}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right], \qquad \left(x_0\equiv\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}\right)$$

を用いてよい．

b．状態が $t=0$ で基底状態に見出される確率の簡潔な表式を求めよ．この確率は $t>0$ で変化するか．

13.　1次元の調和振動子を考える．

a．次式

$$\left.\begin{matrix} a \\ a^\dagger \end{matrix}\right\} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x\pm\frac{ip}{m\omega}\right), \qquad \left.\begin{matrix} a|n> \\ a^\dagger|n> \end{matrix}\right\} = \left\{\begin{matrix} \sqrt{n}\,|n-1> \\ \sqrt{n+1}\,|n+1> \end{matrix}\right.$$

を用いて，　$<m|x|n>$，　$<m|p|n>$，　$<m|\{x, p\}|n>$，$<m|x^2|n>$ および $<m|p^2|n>$ を計算せよ．

b．エネルギー固有状態に関してとった運動エネルギーと位置エネルギーの期待値に対して，ビリアルの定理が成り立つことを確かめよ．

14.　a．　$$<x'|p'> = (2\pi\hbar)^{-1/2}e^{ip'x'/\hbar} \qquad (1次元)$$

を用い

$$\langle p'|x|\alpha\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\langle p'|\alpha\rangle$$

を証明せよ．

b．1次元の調和振動子を考える．状態ベクトルに対するシュレーディンガー方程式から出発して，運動量空間の波動関数に対するシュレーディンガー方程式を導け．（演算子 p と固有値 p' の違いをはっきりとさせよ．）運動量空間におけるエネルギー固有関数を推測できるか．

15. **相関関数**と呼ばれる

$$C(t) = \langle x(t)x(0)\rangle$$

で定義される関数を考える．ここで $x(t)$はハイゼンベルク表示の位置演算子である．1次元の調和振動子の基底状態に対して，相関関数を具体的に計算せよ．

16. 再び1次元の調和振動子を考える．代数的にすなわち波動関数を用いずに，次のことを実行せよ．

a．$\langle x\rangle$をできるだけ大きくするような，$|0\rangle$と$|1\rangle$の1次結合を作れ．

b．振動子が $t=0$ で，(a)で作られた状態にあるとする．$t>0$ に対する状態ベクトルは，シュレーディンガー表示でどうなるか．$t>0$ に対する時間の関数として，期待値 $\langle x\rangle$ を (i) シュレーディンガー表示を用いて (ii) ハイゼンベルク表示を用いて計算せよ．

c．どちらかの表示を用いて，$\langle(\Delta x)^2\rangle$を時間の関数として計算せよ．

17. 1次元の調和振動子に対して

$$\langle 0|e^{ikx}|0\rangle = \exp[-k^2\langle 0|x^2|0\rangle/2]$$

であることを示せ．ここで x は位置演算子である．

18. 1次元調和振動子のコヒーレント状態は，（非エルミート的な）消滅演算子 a の固有状態として定義される：

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle.$$

ここで λ は一般に複素数である．

a．
$$|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2}e^{\lambda a^\dagger}|0\rangle$$

が規格化されたコヒーレント状態であることを示せ．

b．この状態に対して，最小不確定関係を証明せよ．

c．$|\lambda\rangle$を

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)|n\rangle$$

の形に書け．$|f(n)|^2$ の n に関する分布が，ポアソン型であることを示せ．$|f(n)|$を最大にする n の値，したがって E の値を見出せ．

d．コヒーレント状態は(有限変位の)平行移動演算子 $e^{-ipl/\hbar}$ を基底状態に作用させることによっても得られることを示せ．ここで p は運動量演算子で，l は変位の距離である．（Gottfried 1966, pp.262-64をも参考にせよ．）

19. $a_\pm$ および $a_\pm^\dagger$ は通常の交換関係を満足する二つの独立した調和振動子の，消滅および生成演算子である．

$$J_\pm = \hbar\, a_\pm^\dagger a_\mp,\ \ J_z = \frac{\hbar}{2}(a_+^\dagger a_- - a_-^\dagger a_+),$$
$$N = a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_-$$

とするとき

$$[J_z,\ J_\pm] = \pm\hbar J_\pm,\quad [\boldsymbol{J}^2, J_z] = 0,\ \ \boldsymbol{J}^2 = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right)N\left[\left(\frac{N}{2}\right)+1\right]$$

を証明せよ．

20. 次のような形の1次元ポテンシャル

$$V=\begin{cases}\dfrac{1}{2}kx^2, & x>0\\ \infty & ,\ x<0\end{cases}$$

の中にある質量 m の粒子を考える．

a．基底状態のエネルギーはいくらか．

b．基底状態での期待値 $\langle x^2\rangle$ はいくらか．

21. 1次元空間で粒子が2枚の硬い壁の間に捕捉されている：

$$V(x)=\begin{cases}0, & 0<x<L \text{ に対して}\\ \infty, & x<0,\ x>L \text{ に対して}\end{cases}$$

この粒子の $t=0$ での位置は，厳密に $x=L/2$ であると分かっている．この粒子がいろいろなエネルギー固有状態に見出される相対的確率はいくらか．$t>0$ に対する波動関数を書け．（規格化定数の値や収束性など，数学的にやっかいなことに気を使う必要はない．）

22. 1次元空間で定められた中心に，δ- 関数型ポテンシャル

$$V(x)=-v_0\delta(x),\ (v_0\text{は正の実数})$$

によって束縛されている1粒子を考えよう．基底状態の波動関数と束縛エネルギーを見出せ．励起束縛状態はあるか．

23. 質量 m を持つ1次元空間内の粒子が，定められた中心に，δ-関数型引力ポテンシャル

$$V(x)=-\lambda\delta(x),\qquad (\lambda>0)$$

によって束縛されている．時刻 $t=0$ で，このポテンシャルが急に消され

た（すなわち $t>0$ で $V=0$）．$t>0$ に対する波動関数を求めよ．（定量的に求めよ．しかし，現われる積分の計算を実行する必要はない．）

24. 1次元空間（$-\infty<x<\infty$）にある粒子が

$$V=\lambda x, \quad (\lambda>0)$$

から導かれる一定の力を受けている．

a．エネルギースペクトルは連続か不連続か．E で指定されるエネルギー固有関数の近似的表式を書け．またその大よそを図示せよ．

b．Vを

$$V=\lambda|x|$$

で置き換えたとき，どのような変更が必要となるかを簡潔に議論せよ．

25. 中空の円柱殻の内部に閉じこめられた1電子を考える．円柱の軸は z-軸と一致している．波動関数は内側ならびに外側の壁，$\rho=\rho_a$ および $\rho=\rho_b$ の上で，また円柱の底面 $z=0$ と天じょうの面 $z=L$ でゼロになるものとする．

a．エネルギー固有関数を求めよ（規格化のことは考えなくてよい）．エネルギー固有値は

$$E_{lmn}=\left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\right)\left[k_{mn}^2+\left(\frac{l\pi}{L}\right)^2\right]$$

$$(l=1,2,3\cdots,\ m=0,1,2\cdots)$$

で与えられることを示せ．ここで k_{mn} は超越方程式

$$J_m(k_{mn}\rho_b)\,N_m(k_{mn}\rho_a)-N_m(k_{mn}\rho_b)\,J_m(k_{mn}\rho_a)=0$$

の n 番目の根である．

b．上と同じ問題を，$0<\rho<\rho_a$ に均一磁場 $\boldsymbol{B}=B\hat{\boldsymbol{z}}$ がある場合にもう一度考えよ．電子は決して磁場に“接触して”いないのであるが，エネ

ルギー固有値には磁場の影響があることに注意せよ．

c．特に $B=0$ の問題の基底状態を，$B\neq 0$ の問題の基底状態と比較せよ．B が存在しても基底状態のエネルギーが変化しないことを要求すると，"磁束の量子化"

$$\pi\rho_a^2 B=\frac{2\pi N\hbar c}{e}, \qquad (N=0,\ \pm 1,\ \pm 2\cdots\cdots)$$

が得られることを示せ．

26. ポテンシャル $V(x)$ のもとで1次元運動をする粒子を考える．その波動関数は $\exp[iS(x,t)/\hbar]$ で表わされると仮定しよう．$S(x,t)$ が，$\hbar$ をある意味で小さいと見なす範囲で，古典的ハミルトン-ヤコビ方程式を満たすことを証明せよ．古典的ハミルトン-ヤコビ方程式の解から出発し $V(x)$ をゼロと置くことで，平面波の正しい波動関数が得られることを示せ．この特別な場合に，なぜ厳密解が得られたのであろうか．

27. 球座標を用い，水素原子の基底状態と励起状態に対して，確率の流れ $\boldsymbol{j}$ を求めよ．特に $m_l\neq 0$ の状態では，m_l が正か負かに応じて $\boldsymbol{j}$ は ϕ が増加または減少する方向を向き，回転する流れをつくることを示せ．

28. 表式（2.5.16）を導き，さらに（2.5.16）を3次元へ一般化した表式を求めよ．

29. 分配関数を，(2.5.20)-(2.5.22) にあるように

$$Z=\int d^3x'\, K(\boldsymbol{x}',\ t\,;\ \boldsymbol{x}',\ 0)\big|_{\beta=it/\hbar}$$

で定義する．基底状態のエネルギーが

$$-\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta} \qquad (\beta\rightarrow\infty)$$

の計算から得られることを示せ．1次元の箱の中にある粒子を例にして，このことを説明せよ．

30. 表式（2.5.26）に類似した運動量空間のプロパゲーターは，$<\boldsymbol{p}'', t|\boldsymbol{p}', t_0>$ で与えられる．自由粒子の場合に $<\boldsymbol{p}'', t|\boldsymbol{p}', t_0>$ の表式を具体的に導け．

31. a．調和振動子に対する古典的作用量の表式を，有限の時間間隔に対して書け．
    b．調和振動子に対する $<x_n, t_n|x_{n-1}, t_{n-1}>$ を，$t_n - t_{n-1} = \Delta t$ が小さいとしてファインマンの処方箋を用いて構成せよ．$(\Delta t)^2$ の次数までの項を取り，これが（2.5.26）で与えられたプロパゲーターの $t-t_0 \to 0$ とした極限と一致することを示せ．

32. シュウィンガーの作用量法則（Finkelstein 1973，p.155 を参照）を述べよ．シュウィンガーの法則を積分することによって $<x_2, t_2|x_1, t_1>$ の解を求め，これに対応する $<x_2, t_2|x_1, t_1>$ に対するファインマンの表式と比較せよ．二つの表式の古典的極限について述べよ．

33. 2.6節で議論した重力が誘起する干渉の問題を波動力学によって調べても，（2.6.17）の位相差の表式が導けることを示せ．

34. a．表式（2.6.25）と（2.6.27）を確かめよ．
    b．表式（2.6.31）で与えられる $\boldsymbol{j}$ を用い，連続方程式（2.6.30）を確かめよ．

35. 電荷 e を持ちスピンを持たない1粒子のハミルトニアンを考える．静磁場があるとき，場との相互作用の項は $\boldsymbol{A}$ を適切なベクトルポテンシャルとして

$$\boldsymbol{p}_{演算子} \to \boldsymbol{p}_{演算子} - \frac{e\boldsymbol{A}}{c}$$

の置き換えにより作られる．簡単のために磁場 $\boldsymbol{B}$ は一様で z-軸の正方向を向いているとする．上記の処方により実際，磁場 $\boldsymbol{B}$ と軌道磁気モーメ

ント $(e/2mc)\boldsymbol{L}$ との相互作用の正しい表式が導けることを証明せよ．この他に $B^2(x^2+y^2)$ に比例する項もあることを示し，その物理的意味に関し簡単に述べよ．

36. 1個の電子が z-方向を向いた一様な磁場（$\boldsymbol{B}=B\hat{z}$）の中を運動している．

a．

$$[\Pi_x,\ \Pi_y]$$

を計算せよ．ただし

$$\Pi_x \equiv p_x - \frac{eA_x}{c},\quad \Pi_y \equiv p_y - \frac{eA_y}{c}$$

とする．

b．ハミルトニアンと(a)で得られた交換関係を，1次元振動子の問題と比較することによって，エネルギー固有値がただちに

$$E_{k,n} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \left(\frac{|eB|\hbar}{mc}\right)\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

のように表わせることを示せ．ここで $\hbar k$ は p_z 演算子の連続固有値で，n はゼロを含む負でない整数である．

37. 中性子干渉計を考える．計数率に現われる極大値間の間隔に相当する磁場の差は，l を磁場中の経路の長さとして

$$\Delta B = \frac{4\pi\hbar c}{|e|g_n \lambda l}$$

で与えられることを示せ（図3.2を参照）．ここで $g_n(=-1.91)$ は $-e\hbar/(2m_n c)$ を単位にした，中性子の磁気モーメントである．［この問題を読者が1967年に解いていたなら，結果を *Physical Review Letters* に出版できたであろう！］［訳注：第3章第2節参照］

第3章

角運動量の理論

この章では角運動量とそれに関連した話題を，系統的に取り扱う．現代物理学における角運動量の重要性は，いくら強調しても強調しすぎることがない．角運動量を徹底的に理解することは，分子分光，原子分光および核スペクトロスコピーにおいて欠くことができない．角運動量を考えることは，散乱や衝突問題および束縛状態の問題を解く際に重要である．さらに角運動量の概念を一般化すると，核物理のアイソスピン，素粒子物理の SU(3)，SU(2) $\otimes$ U(1)といった重要な概念が得られる．

3.1 回転および角運動量の交換関係

有限回転と無限小回転

初等物理学で学んだように，同じ軸のまわりでの回転は交換するが異なる軸のまわりでの回転は交換しない．例えば z-軸のまわりで30°の回転をさせた後，同じ z-軸のまわりで60°回転させるのと，はじめに60°回転させ続いて30°回転させるのとは，回転軸が同じなので明らかに同値である．しかし z-軸のまわりの90°の回転（$R_z(\pi/2)$ であらわす）の後に，x-軸のまわりの90°の回転（$R_x(\pi/2)$ であらわす）が続く場合を考えよう．これを x-軸のまわりの90°の回転に続く，z-軸のまわりの90°の回転と比較する．最後の結果は，図3.1から見て分かるように異なっている．

我々の最初の基本的課題は，軸が異なる回転が交換しない様子を定量的に調べることである．このためにまず3次元での回転を，3 × 3 の実直交行

列でどう表わすか思い出してみよう．成分が V_x，V_y および V_z であるベクトル $\boldsymbol{V}$ を考える．回転させるとこの3成分は別の数の組，V'_x，V'_y，V'_z になる．新旧の成分は 3×3 の直交行列 R によって関連しており

$$\begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & R & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}, \tag{3.1.1a}$$

$$RR^T = R^T R = 1 \tag{3.1.1b}$$

と表わせる．ここで添字 T は行列の転置を表わす．直交行列の性質から

$$\sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2} = \sqrt{V_x'^2 + V_y'^2 + V_z'^2} \tag{3.1.2}$$

は自動的に満たされる．

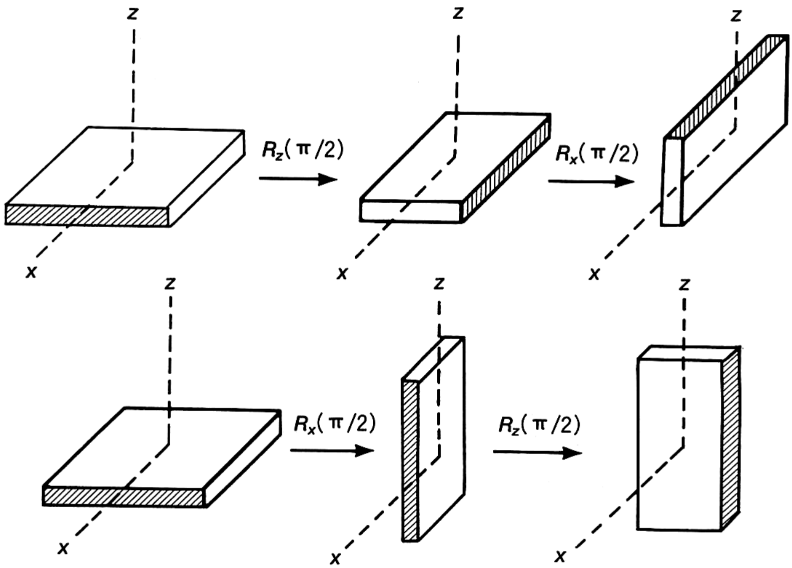


図 3.1. 有限回転の非可換性を図解する例

議論を限定して，z-軸のまわりの角度 ϕ の回転を考える．本書では

常に，回転操作は図3.1のように物理系それ自身におよび，座標軸は不変であるように約束する．考える回転が xy-平面内で z 軸の正の側から見て反時計回りのとき，角度 ϕ は正とする．このような回転に右ねじをあてはめると，z-軸のまわりの ϕ が正の回転は，ねじが z-軸の正の方向に進むことを意味する．この取り決めでは

$$R_z(\phi)=\begin{pmatrix}\cos\phi & -\sin\phi & 0\\ \sin\phi & \cos\phi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{3.1.3}$$

を容易に確認できる．もし別の取り決めを用い，物理系は固定し座標軸を回転させるとすると，ϕ が正の同じ行列は，z-軸の正方向から見た x-軸，y-軸の時計方向の回転を表わすことになる．自明なことだが，両者を混同してはいけない！　著者によっては，物理系が回転するときを“能動的回転”，座標軸が回転するときを“受動的回転”と呼んで二つの方法を区別している．

特に関心があるのは R_z の無限小回転のときの形である：

$$R_z(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1-\dfrac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon & 0\\ \varepsilon & 1-\dfrac{\varepsilon^2}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{3.1.4}$$

ここで ε^3 以上のオーダーの項は無視した．同じように

$$R_x(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1-\dfrac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon\\ 0 & \varepsilon & 1-\dfrac{\varepsilon^2}{2}\end{pmatrix} \tag{3.1.5a}$$

および

$$R_y(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1-\frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon\\ 0 & 1 & 0\\ -\varepsilon & 0 & 1-\frac{\varepsilon^2}{2}\end{pmatrix} \qquad (3.1.5b)$$

が(3.1.4)から x，y，z を循環的に交代させ，$x\to y$，$y\to z$，$z\to x$ とすることにより分かるであろう．ここで，y-軸回転に続いて x-軸回転をさせた効果と，x-軸回転に続いて y-軸回転をさせた効果を比較しよう．初等的な行列演算から

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1-\frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon\\ \varepsilon^2 & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon\\ -\varepsilon & \varepsilon & 1-\varepsilon^2\end{pmatrix} \qquad (3.1.6a)$$

および

$$R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1-\frac{\varepsilon^2}{2} & \varepsilon^2 & \varepsilon\\ 0 & 1-\frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon\\ -\varepsilon & \varepsilon & 1-\varepsilon^2\end{pmatrix} \qquad (3.1.6b)$$

が導ける．(3.1.6a) と (3.1.6b) から最初の重要な結果が得られる．すなわち，異なる軸のまわりの無限小回転は，ε^2 以上のオーダーの項を無視すると交換する*．第二のもっと重要な結果は，異なる軸のまわりの回転が ε^2 のオーダーまでとると交換しない様子を表わすもので

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon)-R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon)=\begin{pmatrix}0 & -\varepsilon^2 & 0\\ \varepsilon^2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

* なじみのある例が実際に初等力学にある．角速度ベクトル $\boldsymbol{\omega}$ は，無限小時間内の無限小の回転角変化を特徴づける量であるが，ベクトルの加法における交換則を含む通常のベクトルの加法則に従う．しかし，有限の角度の変化に，ベクトル的性格を持たすことはできない．

$$= R_z(\varepsilon^2) - 1 \tag{3.1.7}$$

である．この式を導く際に ε^3 以上の高次の項は無視した．また

$$1 = R_{\text{任意}}(0) \tag{3.1.8}$$

が成立つ．上式で任意とは任意の回転軸の意味である．こうして最終的結果を

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) = R_z(\varepsilon^2) - R_{\text{任意}}(0) \tag{3.1.9}$$

と書くことができる．これが異なる軸のまわりの回転操作間の交換関係の一例である．この関係は後に，量子力学の角運動量の交換関係を導くときに用いるであろう．

量子力学における無限小回転

今迄のところ，量子力学の概念を用いていない．行列 R は縦ベクトルの形に書いたベクトル $\mathbf{V}$ にかかる，単なる 3×3 直交行列である．次に量子力学では回転をどう特徴づけるか，理解しなければならない．

回転は物理系に影響をおよぼすのであるから，回転を受けた系の状態ケットは，はじめの回転前の系の状態ケットとは異なって見えると期待される．3×3 の直交行列 R によって特徴づけられる回転操作 R が与えられたとき，これに対して適当なケット空間内の演算子 $\mathscr{D}(R)$ を

$$|\alpha\rangle_R = \mathscr{D}(R)|\alpha\rangle \tag{3.1.10}$$

のように関連させる．ここで $|\alpha\rangle_R$ と $|\alpha\rangle$ は，それぞれ回転後，回転前の系のケットをあらわす*．3×3 の直交行列 R は古典的ベクトルの3成分からなる列ベクトルに作用するが，演算子 $\mathscr{D}(R)$ はケット空間の状態ベクトルに作用することに注意しよう．$\mathscr{D}(R)$ の行列表現は次節以降で詳しく調べるが，問題

---

* 記号 $\mathscr{D}$ はドイツ語の *Drehung* に由来し，回転を意味する．

にする個々のケット空間の次元 N に依存する．スピン1/2の系では他に自由度がないので $N=2$ であり，$\mathscr{D}(R)$は 2×2 の行列で表わされる．スピン1の系では対応する表現が 3×3 のユニタリー行列になる，といった具合である．

回転演算子 $\mathscr{D}(R)$を構成するのに，まず無限小回転の下での性質を調べることが有用である．いかに進むべきかはアナロジーによりほぼ推量することができる．平行移動と時間的発展の場合を，1.6節と2.1節でそれぞれ学んだが，いずれの場合も，該当する無限小演算子はエルミート演算子 G を用いて

$$U_\varepsilon = 1 - i\,G\varepsilon \tag{3.1.11}$$

と書くことができた．特に x 方向に dx' の変位をする無限小平行移動では

$$G \rightarrow \frac{p_x}{\hbar}, \qquad \varepsilon \rightarrow dx' \tag{3.1.12}$$

であり，dt の時間変位をする無限小の時間的発展では

$$G \rightarrow \frac{H}{\hbar}, \qquad \varepsilon \rightarrow dt \tag{3.1.13}$$

である．古典力学から分かるように，角運動量は回転の生成演算子であり，それはちょうど運動量とハミルトニアンがそれぞれ平行移動と時間的発展の生成演算子であるのと同様である．そこで我々は，k-軸のまわりの角度 $d\phi$ だけの無限小回転の演算子が，(3.1.11)で

$$G \rightarrow \frac{J_k}{\hbar}, \qquad \varepsilon \rightarrow d\phi \tag{3.1.14}$$

と置くことで得られるように，角運動量演算子 J_k を定義する．J_k をエルミート的にとると無限小回転演算子はユニタリー的であることが保証され，また $d\phi \rightarrow 0$ の極限で恒等演算子に帰する．さらに一般的に，単位ベクトル $\hat{\boldsymbol{n}}$ で表わされる方向のまわりを無限小角度 $d\phi$ だけまわる回転に対しては

$$\mathscr{D}(\hat{\boldsymbol{n}}, d\phi) = 1 - i\left(\frac{\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}}{\hbar}\right)d\phi \tag{3.1.15}$$

とする．

この教科書では角運動量演算子を $\boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p}$ と定義しているのでないことを，強調しよう．我々の一般論はスピン角運動量にも適用できるが，スピンに x_i や p_j は関係しないからこの点は重要である．別の言い方をしてみると，古典力学では $\boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p}$ で定義された角運動量が回転の生成演算子であることを証明できるのに対して，量子力学では無限小回転の演算子が(3.1.15)の形になるように $\boldsymbol{J}$ を定義するのである．

有限の回転は，同じ軸のまわりの無限小回転を次々と重ね合わせることで得られる．例えば z-軸のまわりの角度 ϕ だけの有限な回転に対しては

$$\begin{aligned}\mathscr{D}_z(\phi) &= \lim_{N\to\infty}\left[1 - i\left(\frac{J_z}{\hbar}\right)\left(\frac{\phi}{N}\right)\right]^N \\ &= \exp\left(\frac{-iJ_z\phi}{\hbar}\right) \\ &= 1 - \frac{iJ_z\phi}{\hbar} - \frac{J_z^2\phi^2}{2\hbar^2} + \cdots\cdots \end{aligned} \tag{3.1.16}$$

を考えればよい．

角運動量の交換関係を得るのに，必要となる考えがもう一つある．さきほど指摘したように，3×3 の直交行列 R で表わされる回転のそれぞれには，適当なケット空間内の回転演算子 $\mathscr{D}(R)$ が存在する．これに加えて $\mathscr{D}(R)$ が R と同じ群の性質を持つことを要請しよう：

恒等関係： $R\cdot 1 = R \Rightarrow \mathscr{D}(R)\cdot 1 = \mathscr{D}(R)$　(3.1.17a)

閉　包： $R_1R_2 = R_3 \Rightarrow \mathscr{D}(R_1)\mathscr{D}(R_2) = \mathscr{D}(R_3)$　(3.1.17b)

逆　： $RR^{-1} = 1 \Rightarrow \mathscr{D}(R)\mathscr{D}^{-1}(R) = 1$　(3.1.17c)

$R^{-1}R = 1 \Rightarrow \mathscr{D}^{-1}(R)\mathscr{D}(R) = 1$

結　合： $R_1(R_2R_3) = (R_1R_2)R_3 = R_1R_2R_3$　(3.1.17d)

$\Rightarrow \mathscr{D}(R_1)[\mathscr{D}(R_2)\mathscr{D}(R_3)]$

$$= [\mathscr{D}(R_1)\mathscr{D}(R_2)]\mathscr{D}(R_3)$$
$$= \mathscr{D}(R_1)\mathscr{D}(R_2)\mathscr{D}(R_3).$$

ここで行列 R を用いて表わされた回転操作の基本的交換関係式 (3.1.9) に戻ろう．回転演算子の場合これに類似した式は

$$\left(1-\frac{iJ_x\varepsilon}{\hbar}-\frac{J_x^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right)\left(1-\frac{iJ_y\varepsilon}{\hbar}-\frac{J_y^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right)$$
$$-\left(1-\frac{iJ_y\varepsilon}{\hbar}-\frac{J_y^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right)\left(1-\frac{iJ_x\varepsilon}{\hbar}-\frac{J_x^2\varepsilon^2}{2\hbar^2}\right)=1-\frac{iJ_z\varepsilon^2}{\hbar}-1 \tag{3.1.18}$$

と書けよう．オーダー ε の項は自動的に落ちる．オーダー ε^2 の項を(3.1.18)の両辺で等しいと置くと，

$$\left[J_x\ ,\ J_y\right]=i\hbar J_z \tag{3.1.19}$$

が得られる．このような議論を他の軸のまわりの回転について繰り返すと，**角運動量の基本的交換関係**として知られる

$$\left[J_i\ ,\ J_j\right]=i\hbar\,\varepsilon_{ijk}J_k \tag{3.1.20}$$

が得られる．

一般に無限小変換の生成演算子が交換しないとき，対応する操作の群は**非アーベル型**であるという．(3.1.20) が成り立つから，3次元の回転群は非アーベル型である．これに対し，3次元の平行移動群は，p_i と p_j が $i \neq j$ であっても交換するので，アーベル型である．

交換関係(3.1.20)を求めるにあたって，次の二つの考え方を使ったことを強調しよう：

1．J_k はk-軸のまわりの回転の生成演算子である．

2．異なる軸のまわりの回転は，交換しない．

交換関係(3.1.20)は，3次元の回転の基本的性質のすべてを簡潔な形で要約しているといっても，言い過ぎでない．

3.2　スピン 1/2 の系と有限回転

スピン 1/2 に対する回転演算子

角運動量の交換関係(3.1.20)を実現する最小の次元数 N は，$N=2$ である．読者は既に第1章の問題8で，次のように定義される演算子

$$
\begin{aligned}
S_x &= \frac{\hbar}{2}\Big\{(|+\rangle\langle-|)+(|-\rangle\langle+|)\Big\},\\
S_y &= \frac{i\hbar}{2}\Big\{-(|+\rangle\langle-|)+(|-\rangle\langle+|)\Big\},\\
S_z &= \frac{\hbar}{2}\Big\{(|+\rangle\langle+|)-(|-\rangle\langle-|)\Big\}
\end{aligned}
\tag{3.2.1}
$$

が，J_k の代わりに S_k と置いた交換関係(3.1.20)を満たすことを確かめている．自然界が，(3.1.20)を実現するこの最小次元をなぜ利用しているのかは自明でないが，原子分光から核磁気共鳴に至る数えきれないほどの実験から，実際にそうであることが十分確かめられる．

z-軸のまわりの有限角度 ϕ の回転を考えよう．回転前のスピン1/2の系のケットを $|\alpha\rangle$ とすると，回転後のケットは

$$|\alpha\rangle_R = \mathscr{D}_z(\phi)|\alpha\rangle, \tag{3.2.2}$$

$$\mathscr{D}_z(\phi) = \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) \tag{3.2.3}$$

で与えられる。この演算子が実際に物理系を回転させていることを確かめるために，$\langle S_x\rangle$ に与える効果に着目しよう．回転を受けて，この期待値は

$$\langle S_x\rangle \rightarrow {}_R\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle_R = \langle\alpha|\mathscr{D}_z^{\dagger}(\phi)S_x\mathscr{D}_z(\phi)|\alpha\rangle \tag{3.2.4}$$

のように変化する．そこで

$$\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) S_x \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) \qquad (3.2.5)$$

を計算しなければならない．教育的見地から，これを二通りの方法で計算しよう．

導出1：ここでは(3.2.1)で与えられる S_x の特定な形を利用する．すると，(3.2.5) より，

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\hbar}{2}\right)\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right)\left\{(|+\rangle\langle-|)+(|-\rangle\langle+|)\right\}\exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right)\\
&=\left(\frac{\hbar}{2}\right)\left(e^{i\phi/2}|+\rangle\langle-|e^{i\phi/2}+e^{-i\phi/2}|-\rangle\langle+|e^{-i\phi/2}\right)\\
&=\frac{\hbar}{2}\Big[\left\{(|+\rangle\langle-|)+(|-\rangle\langle+|)\right\}\cos\phi+i\left\{(|+\rangle\langle-|)\right.\\
&\qquad\left.-(|-\rangle\langle+|)\right\}\sin\phi\Big]\\
&=S_x\cos\phi-S_y\sin\phi
\end{aligned} \qquad (3.2.6)$$

が得られる．

導出2：もう一つの方法として，(3.2.5) を評価するのに，公式(2.3.47) を用いる：

$$\begin{aligned}
\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) S_x \exp\left(-\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) &= S_x + \left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)\underbrace{[S_z, S_x]}_{i\hbar S_y}\\
&+\left(\frac{1}{2!}\right)\left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^2\underbrace{[S_z, \underbrace{[S_z, S_x]}_{i\hbar S_y}]}_{\hbar^2 S_x}
\end{aligned}$$

$$+\left(\frac{1}{3!}\right)\left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^3 \underbrace{[S_z, \underbrace{[S_z, [S_z, S_x]]}_{\hbar^2 S_x}]}_{i\hbar^3 S_y} + \cdots\cdots$$

$$= S_x\left[1 - \frac{\phi^2}{2!} + \cdots\right] - S_y\left[\phi - \frac{\phi^3}{3!} + \cdots\right]$$

$$= S_x \cos\phi - S_y \sin\phi. \tag{3.2.7}$$

導出 2 では S_i の交換関係のみを使っていることに注目して欲しい．したがってこの方法は，1/2より大きい角運動量の系の回転にも一般化できる．

スピン1/2の系では，どちらの方法も

$$\langle S_x \rangle \to {}_R\langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R$$

$$= \langle S_x \rangle \cos\phi - \langle S_y \rangle \sin\phi \tag{3.2.8}$$

を与える．ここで添字のない期待値は，（もとの）回転を受けていない系に関してとることにする．同様にして

$$\langle S_y \rangle \to \langle S_y \rangle \cos\phi + \langle S_x \rangle \sin\phi \tag{3.2.9}$$

が成り立つ．S_z の期待値については，S_z と $\mathscr{D}_z(\phi)$ が交換するので変化がない：

$$\langle S_z \rangle \to \langle S_z \rangle. \tag{3.2.10}$$

関係式(3.2.8)，(3.2.9) および (3.2.10) は極めてもっともな式である．これらの式は，状態ケットにかかった回転演算子 (3.2.3) が，実際 $\boldsymbol{S}$ の期待値を z-軸のまわりに角度 ϕ だけ回転させていることを示している．別の言葉でいえば，スピン演算子の期待値は回転の際にあたかも古典的ベクトルのようにふるまう：

$$\langle S_k \rangle \rightarrow \sum_l R_{kl} \langle S_l \rangle. \tag{3.2.11}$$

ここで R_{kl} は該当する回転を特徴づける 3×3 の直交行列 R の要素である．導出2から明らかなように，この性質はスピン1/2の系のスピン演算子に限った性質でない．一般に J_k を，角運動量の交換関係(3.1.20)を満たす回転の生成演算子とするとき，回転のもとで

$$\langle J_k \rangle \rightarrow \sum_l R_{kl} \langle J_l \rangle \tag{3.2.12}$$

が成り立つ．後に，こうした関係式がさらに一般化されて任意のベクトル演算子に対して成立することを示そう．

今迄のところ，すべて期待通りの結果であった．ところがここで読者を驚かすことにしよう．一般のケット

$$|\alpha\rangle = |+\rangle\langle+|\alpha\rangle + |-\rangle\langle-|\alpha\rangle \tag{3.2.13}$$

に対する回転演算子(3.2.3)の効果を，少し詳しく調べる．すると

$$\exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right)|\alpha\rangle = e^{-i\phi/2}|+\rangle\langle+|\alpha\rangle + e^{i\phi/2}|-\rangle\langle-|\alpha\rangle \tag{3.2.14}$$

が分かる．ここに半角 $\phi/2$ が現われていることが，極めて興味深い結果をもたらす．

2π の回転を考えよう．このとき

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{R_z(2\pi)} -|\alpha\rangle \tag{3.2.15}$$

となる．つまり360°回転した系のケットは，もとのケットとマイナスの符号だけ異なる．プラスの符号を持つ同じケットに戻るためには，720°($\phi=4\pi$)の回転が必要なのである．このマイナスの符号は $\mathbf{S}$ の期待値では消えていることに注意しよう．$\mathbf{S}$ は，どちらも符号を変える $|\alpha\rangle$ と $\langle\alpha|$ にはさまれてい

るからである．一体このマイナスの符号は，観測にかかるのであろうか．この興味ある疑問に答えるのは，スピンの歳差運動をもう一度議論してからにしよう．

スピンの歳差運動　再考

ここで2.1節で議論したスピンの歳差運動の問題を，新しい観点から取り扱う．この問題の基礎となるハミルトニアンは

$$H = -\left(\frac{e}{m_e c}\right) \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{B} = \omega S_z, \tag{3.2.16}$$

$$\omega \equiv \frac{|e|B}{m_e c} \tag{3.2.17}$$

で与えられることを思い出そう．このハミルトニアンに基づく時間的発展の演算子は

$$\mathscr{U}(t,\ 0) = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{-iS_z\omega t}{\hbar}\right) \tag{3.2.18}$$

で与えられる．この等式を (3.2.3) と比較すると，ここで時間的発展の演算子はまさに (3.2.3) の回転演算子と同じで，ϕ を ωt に等しくしたものであることが分かる．このようにしてハミルトニアンがなぜスピンを歳差運動させるのかがすぐに分かる．(3.2.8)，(3.2.9) および (3.2.10) を書き換えると

$$< S_x >_t = < S_x >_{t=0} \cos\omega t - < S_y >_{t=0} \sin\omega t, \tag{3.2.19a}$$

$$< S_y >_t = < S_y >_{t=0} \cos\omega t + < S_x >_{t=0} \sin\omega t, \tag{3.2.19b}$$

$$< S_z >_t = < S_z >_{t=0} \tag{3.2.19c}$$

が得られる．スピンは $t=2\pi/\omega$ だけ時間がたつと，始めの向きに戻る．

この一組の等式は，電子に似た粒子であるが，質量が207倍重い**ミュー粒子**の，スピン歳差運動を議論するのに用いられる．ミュー粒子の磁気モーメントは，他の実験，例えば正のミュー粒子と電子との束縛状態である，

ミューオニウムの超微細分裂から $e\hbar/2m_\mu c$ と決定できる．この値はスピン1/2の粒子に対するディラックの相対論的理論から期待される値である．(ここでは場の量子論の効果である非常に小さい補正項を無視しよう.) 磁気モーメントが分かると，歳差運動の角振動数を予言できる．したがって(3.2.19)は実験的に確認可能であり，事実確認されてきた．実際に外部磁場がスピンの歳差運動を起すときのスピンの方向は，ミュー粒子の崩壊の際に出る電子がミュー粒子のスピンと逆方向に放出される傾向を持つことを利用して解析される．

ここで状態ケットそのものの時間的発展を調べよう．初期ケット($t=0$)が(3.2.13)で与えられることを仮定すると，t だけ時間が経ったあと

$$|\alpha, t_0=0; t> = e^{-i\omega t/2}|+><+|\alpha> + e^{+i\omega t/2}|-><-|\alpha> \tag{3.2.20}$$

となる．表式(3.2.20)は $t=2\pi/\omega$ で符号がマイナスになり，符号が同じ初めの状態ケットに戻るには，$t=4\pi/\omega$ まで待たなくてはならない．要約すれば，状態ケットの周期はスピンの歳差運動の周期に比べて2倍長く

$$\tau_{歳差} = \frac{2\pi}{\omega}, \tag{3.2.21a}$$

$$\tau_{状態ケット} = \frac{4\pi}{\omega} \tag{3.2.21b}$$

である．

2π 回転を調べる中性子干渉法の実験

ここで(3.2.15)式にあるマイナスの符号を検出するために行われた実験について述べよう．自明なことであるが，世の中のすべての状態ケットにマイナスの符号がかかったら，観測可能な効果はない．予想されるマイナスの符号を検出する唯一の方法は，回転した系と回転しない系との比較をすることである．2.6節では重力のひきおこす量子的干渉を議論したが，ここでも，たくみな中性子干渉法を用いて，この量子力学の驚くべき予言を確かめる．

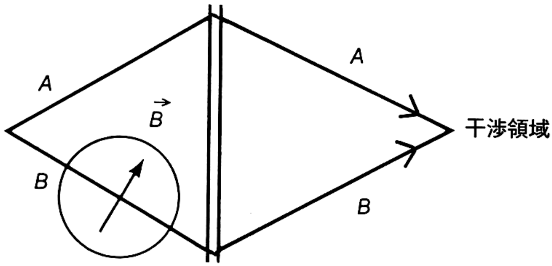


図 3.2. 2π 回転の際予想されるマイナスの符号を調べる実験

エネルギーがほぼ単一にそろった熱中性子線を，経路 A，B の 2 つに分割する．(図3.2を見よ．) 経路 A は磁場のない領域のみを通る．これに対し経路 B には静磁場が存在する小領域がある．その結果，経路 B を通る中性子の状態ケットは，位相の変化 $e^{\mp i\omega T/2}$ を受ける．ここで T は $\mathbf{B} \neq 0$ の領域を通過する時間であり，ω は $g_n e\hbar/2m_p c$ の磁気モーメントを持つ中性子の，スピン歳差運動の角振動数

$$\omega = \frac{g_n eB}{m_p c}, \quad (g_n \simeq -1.91^{\dagger}) \tag{3.2.22}$$

である．これは磁気モーメントが $e\hbar/2m_e c$ の電子に対して成り立つ(3.2.17)式と比較して理解できる．図3.2の干渉領域で経路 A と経路 B が出会うとき，経路 B を通って来た中性子の振幅は

$$c_2 = c_2(B=0)e^{\mp i\omega T/2} \tag{3.2.23}$$

であり，一方経路 A を通って来た中性子の振幅は，磁場に関係なく c_1 である．そこで干渉領域で観測される強度は，正弦曲線的変化

$$\cos\left(\frac{\mp\omega T}{2} + \delta\right) \tag{3.2.24}$$

を示すに違いない．ここで δ は c_1 と $c_2(B=0)$ との位相差である．実際には，

† 訳注：いわゆる g-因子（磁気回転比）はこの 2 倍である．

$B \neq 0$ の領域を通過する時間 T は一定とし，磁場の強さを変化させることで歳差運動の角振動数 ω を変える．干渉領域での強度は，B の関数として正弦曲線的変化をすることが予測される．この曲線で山と山との間の B の差を ΔB とすると，l を磁場中の経路の長さとして

$$\Delta B = \frac{4\pi \hbar c}{e g_n \lambda\!\!\!^{-} l} \tag{3.2.25}$$

であることが容易に示される．[訳注：$\lambda\!\!\!^{-}$ は（中性子の波長）/(2π)．]

この式を導くにあたって，状態ケットが同じ符号を持つ初めのケットに戻るのに，4π の回転が必要となる事実を用いた．これは我々の理論枠組から要請された．一方，仮にスピン1/2の系に対するこの議論が誤まっていて，ケットが同符号の初めのケットに 2π の回転で戻れるとすると，ΔB の予想値は(3.2.25) のちょうど半分となる．

異なる2グループが，(3.2.25) の予想が誤差1％以内の精度で正しいことを実験的に確かめた*．これもまた量子力学の一つの勝利である．自明でない予想 (3.2.15) が実験的に直接確かめられたのである．

パウリの2成分形式

スピン1/2の系の状態ケットに関する演算は，1926年 W.パウリによって導かれた2成分スピノル形式を用いると，容易に実行できる．1.3節でケット（ブラ）を列（行）ベクトルで表わす方法を学んだ．この表記では，ある指定した基底ケットの組に関する展開係数を，列（行）ベクトルに並べればよい．スピン1/2の場合には，基底ケットとブラを

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_+, \quad |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_-$$

$$\langle +| \doteq (1,\ 0) = \chi_+^\dagger, \quad \langle -| \doteq (0,\ 1) = \chi_-^\dagger \tag{3.2.26}$$

* H. Rauch *et al.*, *Phys. Lett.* **54A**, 425 (1975); S. A. Werner *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **35** (1975),1053.

と表わすと，任意の状態ケットとそれに対応する状態ブラは

$$
\begin{aligned}
|\alpha> &= |+><+|\alpha> + |-><-|\alpha> \\
&\doteq \begin{pmatrix} <+|\alpha> \\ <-|\alpha> \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.2.27a}
$$

および

$$
\begin{aligned}
<\alpha| &= <\alpha|+><+| + <\alpha|-><-| \\
&\doteq (<\alpha|+>,\ <\alpha|->)
\end{aligned} \tag{3.2.27b}
$$

と書ける．(3.2.27a) の列ベクトルを，**2 成分スピノル**と呼び

$$
\chi = \begin{pmatrix} <+|\alpha> \\ <-|\alpha> \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = c_+\chi_+ + c_-\chi_- \tag{3.2.28}
$$

と表わす．c_+ と c_- は一般に複素数である．$\chi^\dagger$ に対しては

$$
\chi^\dagger = (<\alpha|+>, <\alpha|->) = (c_+^*,\ c_-^*) \tag{3.2.29}
$$

である．

行列要素 $<\pm|S_k|+>$ および $<\pm|S_k|->$ は，$\hbar/2$ の因子は別にして，**パウリ行列**として知られる 2 × 2 の行列 σ_k の行列要素に等しいと置くことができる．すなわち次のように等置する：

$$
\begin{aligned}
<\pm|S_k|+> &\equiv \left(\frac{\hbar}{2}\right)(\sigma_k)_{\pm,+}\ , \\
<\pm|S_k|-> &\equiv \left(\frac{\hbar}{2}\right)(\sigma_k)_{\pm,-}.
\end{aligned} \tag{3.2.30}
$$

すると期待値 $<S_k>$ を χ と σ_k を用いて表わすことができる：

$$
\begin{aligned}
<S_k> &= <\alpha|S_k|\alpha> \\
&= \sum_{a'=+,-}\ \sum_{a''=+,-} <\alpha|a'><a'|S_k|a''><a''|\alpha>
\end{aligned}
$$

$$= \left(\frac{\hbar}{2}\right)\chi^{\dagger}\sigma_k\chi. \tag{3.2.31}$$

最後の行で通常の行列の積の演算規則を用いた．具体的に書くと，(3.2.1) と (3.2.30) とから分かるように

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.2.32}$$

である．添字 1，2，3 は，それぞれ x，y，z を表わす．

パウリ行列の性質をいくつか記しておこう．まず

$$\sigma_i^2 = 1 \tag{3.2.33a}$$

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 0, \quad i \neq j \tag{3.2.33b}$$

である．(3.2.33a)の右辺は 2 × 2 の単位行列と解釈する．この 2 つの関係式はもちろん反交換関係

$$\{\sigma_i,\ \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \tag{3.2.34}$$

と同等である．さらに交換関係

$$[\sigma_i,\ \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \tag{3.2.35}$$

が成り立つが，これは角運動量の交換関係 (3.1.20) を 2 × 2 の行列として具体的に表わしたものと見ることができる．(3.2.34) と (3.2.35) を合わせると

$$\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3\cdots \tag{3.2.36}$$

が得られる．また

$$\sigma_i^{\dagger} = \sigma_i \tag{3.2.37a}$$

$$\det(\sigma_i) = -1 \tag{3.2.37b}$$

$$\mathrm{tr}(\sigma_i) = 0 \tag{3.2.37c}$$

にも注目しよう．

ここで $\boldsymbol{a}$ を 3 次元のベクトルとし，$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}$ を考える．これは実際 2 × 2 の行列と解釈されて

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}=\sum_k a_k\sigma_k=\begin{pmatrix} +a_3 & a_1-ia_2 \\ a_1+ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} \tag{3.2.38}$$

となる．さらに，非常に重要な恒等式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b})=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}) \tag{3.2.39}$$

がある．この証明に必要なのは反交換関係 (3.2.34) と交換関係(3.2.35)だけである：

$$\begin{aligned}\sum_j\sigma_j a_j\ \sum_k\sigma_k b_k &= \sum_j\sum_k\left(\frac{1}{2}\{\sigma_j,\ \sigma_k\}+\frac{1}{2}[\sigma_j,\ \sigma_k]\right)a_j b_k \\ &= \sum_j\sum_k(\delta_{jk}+i\varepsilon_{jkl}\sigma_l)a_j b_k \\ &= \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}). \end{aligned} \tag{3.2.40}$$

もし $\boldsymbol{a}$ の成分がすべて実数なら

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a})^2=|\boldsymbol{a}|^2 \tag{3.2.41}$$

が成り立つ．ここで $|\boldsymbol{a}|$ はベクトル $\boldsymbol{a}$ の大きさである．

2 成分形式での回転

ここで回転演算子 $\mathscr{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\phi)$ の 2 × 2 行列表現を調べよう．

$$\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi}{\hbar}\right)\doteq\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi}{2}\right) \tag{3.2.42}$$

である．(3.2.41) より導ける

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})^m=\begin{cases}1 & m:\text{偶数}\\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}} & m:\text{奇数}\end{cases} \tag{3.2.43}$$

を用いると

$$\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi}{2}\right)=\left[1-\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})^2}{2!}\left(\frac{\phi}{2}\right)^2+\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})^4}{4!}\left(\frac{\phi}{2}\right)^4-\cdots\right]$$

$$-i\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})\frac{\phi}{2}-\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})^3}{3!}\left(\frac{\phi}{2}\right)^3+\cdots\right]$$

$$=\mathbf{1}\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \tag{3.2.44}$$

と書くことができる．具体的に2×2の行列の形では

$$\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi}{2}\right)$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)-in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (-in_x-n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\\ (-in_x+n_y)\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right)+in_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\end{pmatrix} \tag{3.2.45}$$

となる．演算子 $\exp(-i\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi/\hbar)$ が状態ケット $|\alpha>$ に作用するのとちょうど同じ様に，2×2行列 $\exp(-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi/2)$ は2成分スピノル χ に作用する．すなわち回転に伴って，χ を

$$\chi\rightarrow\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi}{2}\right)\chi \tag{3.2.46}$$

のように変化させる．一方 σ_k 自身は回転操作の下で，変化を受けない．したがって厳密に言えば，見かけとは異なり $\boldsymbol{\sigma}$ はベクトルと見なすべきものでない．ベクトル変換の性質に従うのは，$\boldsymbol{\sigma}$ でなく $\chi^\dagger\boldsymbol{\sigma}\chi$ である：

$$\chi^\dagger\sigma_k\chi\rightarrow\sum_l R_{kl}\,\chi^\dagger\sigma_l\,\chi. \tag{3.2.47}$$

これを実際に示すには

$$\exp\left(\frac{i\sigma_3\phi}{2}\right)\sigma_1\exp\left(\frac{-i\sigma_3\phi}{2}\right)$$

$$= \sigma_1\cos\phi - \sigma_2\sin\phi \qquad (3.2.48)$$

などを用いるとよい。この式は (3.2.6) を 2×2 の行列で書いたことに相当する.

ケット形式で 2π 回転を議論したとき，スピン1/2のケット $|\alpha>$ が $-|\alpha>$ になることを見てきた．これを 2×2 の行列の形でいえば，(3.2.44) より明らかに任意の $\hat{\boldsymbol{n}}$ に対して

$$\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi}{2}\right)\Bigg|_{\phi=2\pi} = -1 \qquad (3.2.49)$$

となる.

回転行列 (3.2.45) を応用した教育的な例として，$\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$ の固有スピノルで固有値＋1 を持つものをどのように作ったらよいか考えよう．ここで $\hat{\boldsymbol{n}}$ はある決まった方向の単位ベクトルである．目標は

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\chi = \chi \qquad (3.2.50)$$

を満たす χ を作ることである．いい換えれば

$$\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+> = \left(\frac{\hbar}{2}\right)|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+> \qquad (3.2.51)$$

で定義される $|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+>$ の，2成分列ベクトル表現を捜すことである．実際これは直接に固有値問題として解くことができる（第1章，問題9参照）が，ここでは回転行列(3.2.45)に基づく別法を与えよう.

単位ベクトル $\hat{\boldsymbol{n}}$ が z-軸となす角度を β，x-軸から測った方位角を α とする．はじめに上向きスピン状態を表わす2成分スピノル $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ を取ろう．まずこれを y-軸のまわりに角度 β だけ回し，続いて z-軸のまわりに角度 α だけ回す．すると目的のスピン状態が得られる．（図3.3を見よ．）パウリのスピノルを用いて書くと，この一連の操作は $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ に $\exp(-i\sigma_2\beta/2)$ をかけ，続いて $\exp(-i\sigma_3\alpha/2)$ をかけることと同値である．合成した結果は

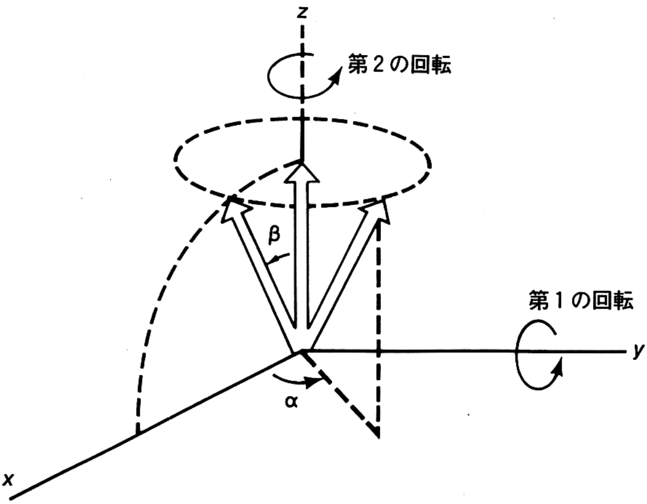


図 3.3.　$\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$の固有スピノルを作る図

$$\chi=\left[\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)-i\sigma_3\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\right]\left[\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)-i\sigma_2\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)-i\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & 0\\ 0 & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)+i\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\end{pmatrix}$$

$$\times\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{-i\alpha/2}\\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{+i\alpha/2}\end{pmatrix}\tag{3.2.52}$$

となる．上下成分に共通の位相因子は物理的意味を持たないので，これは第1章の問題9の結果と完全に一致する．

3.3 O(3), SU(2)およびオイラーの回転†

直 交 群

前2節で扱ってきた回転操作の群としての特性を，ここで少し系統的に調べよう．

回転を表わす最も初歩的な方法は，回転軸と回転角を指定することである．明らかに，一般の回転を特徴づけるには三つの実数が要る．回転軸の方向に向いた単位ベクトル $\hat{\boldsymbol{n}}$ の z-軸となす角と方位角，および回転角の ϕ である．同じ回転をベクトル $\hat{\boldsymbol{n}}\phi$ の三つの直交座標で指定しても同値である．しかしながら回転をこのように指定するのは，回転の群としての性質を調べる立場からは，あまり便利でない．第一に，ϕ が無限小か $\hat{\boldsymbol{n}}$ が常に同方向を向いているかでなければ，相続く回転を表わすのに $\hat{\boldsymbol{n}}\phi$ の形のベクトルを足し合わすことができない．3 × 3 の直交行列 R を用いれば，ずっと簡単である．相続く回転の効果は，単に適当な直交行列をかけて得られるからである．

独立なパラメータは，3 × 3 直交行列の中にいくつあるだろうか．実数の 3 × 3 行列は 9 個の成分を持つが，直交性による制限

$$RR^T = 1 \tag{3.3.1}$$

がある．この制限は積 RR^T が，R^TR でも同じであるが，6 個の独立成分を持つ対称行列であることから，6 個の独立な方程式に対応する．その結果，R には 3 （すなわち 9 − 6 ）個の独立な数があり，先にもっと初歩的な方法で求めた数と同じになる．

直交行列の積の演算の集合は，群を構成する．つまり次の四つの要請が満たされている：

1．任意の二つの直交行列の積は，直交行列である．これは

$$(R_1R_2)(R_1R_2)^T = R_1R_2R_2{}^TR_1^T = 1 \tag{3.3.2}$$

---

† 訳注：この節で扱う直交群は O(3) というより空間反転を含まない SO(3) である．

より，満足されている．

2．結合則が成り立つ：

$$R_1(R_2R_3) = (R_1R_2)R_3. \tag{3.3.3}$$

3．単位行列1は

$$R1 = 1R = R \tag{3.3.4}$$

により定義され，すべての直交行列の集合に含まれる元である．物理的には，回転しないことに対応する．

4．逆行列 R^{-1} は

$$RR^{-1} = R^{-1}R = 1 \tag{3.3.5}$$

により定義され，元の一つである．物理的には，逆回転に対応する．

この群は **O(3)** と名づけられている．O は直交（orthogonal）を表わし，3は次元を表わす．

ユニタリー・ユニモジュラー群†

前節で任意の回転を表わす，もう一つの方法を学んでいる．すなわち，2成分スピノル χ に作用する 2×2 行列，(3.2.45)である．明らかに，(3.2.45)はユニタリーである．その結果，(3.2.28)で定義される c_+，c_- に対して

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1 \tag{3.3.6}$$

が常に成り立つ．さらに行列(3.2.45)はユニモジュラー（unimodular）であ

† 訳注：行列式が1であることをここではユニモジュラーと呼んでいる．数学ではふつうこのような行列の群を特殊線形群という．

る．すなわち以下に実際に示すように行列式が1である．

最も一般的なユニタリー・ユニモジュラー行列は

$$U(a,\ b)=\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \tag{3.3.7}$$

と表わすことができる．ここで，a と b は複素数で，ユニモジュラー条件

$$|a|^2+|b|^2=1 \tag{3.3.8}$$

を満たす．(3.3.7)のユニタリー性は，(3.3.8)を用いて容易に確かめられる：

$$U(a,\ b)^\dagger\, U(a,\ b) = \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}=1. \tag{3.3.9}$$

(3.3.7)に含まれる独立な実数パラメータは，この場合も3個であることに注目しよう．

スピン1/2系の回転を表わす 2×2 行列(3.2.45)が，$U(a,b)$ のように書けることは容易に分かる．(3.2.45)を(3.3.7)と比較して

$$\begin{aligned} \mathrm{Re}(a)&=\cos\left(\frac{\phi}{2}\right), & \mathrm{Im}(a)&=-n_z\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ \mathrm{Re}(b)&=-n_y\sin\left(\frac{\phi}{2}\right), & \mathrm{Im}(b)&=-n_x\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{aligned} \tag{3.3.10}$$

と同定できる．これよりユニモジュラー性(3.3.8)は直ちに導ける．逆に(3.3.7)の形の最も一般的なユニタリー・ユニモジュラー行列が，回転を表わすと解釈できることも明らかである．

二つの複素数 a と b は，**ケーリー・クラインのパラメータ**と呼ばれている．歴史的に見るとユニタリー・ユニモジュラー行列と回転との関連性は，量子力学の誕生前，早くから分かっていた．実際ケーリー・クラインのパラメータは剛体の力学でジャイロスコープの複雑な運動を表わすのに使われていた．

ユニタリー・ユニモジュラー行列が回転を表わすという解釈に頼らず，ユニタリー・ユニモジュラー行列の積の演算が持つ群としての性質を直接に確かめることができる．特に

$$U(a_1, b_1)\,U(a_2, b_2) = U(a_1a_2 - b_1b_2^*, a_1b_2 + a_2^*b_1) \qquad (3.3.11)$$

に注目しよう．積の行列がユニモジュラーの条件を満たすことは

$$|a_1a_2 - b_1b_2^*|^2 + |a_1b_2 + a_2^*b_1|^2 = 1 \qquad (3.3.12)$$

より直ちに分かる．U の逆行列は

$$U^{-1}(a, b) = U(a^*, -b) \qquad (3.3.13)$$

である．この群は **SU(2)** と呼ばれている．S は“特殊（special)”，U は“ユニタリー（unitary)”そして 2 は次元の 2 を表わしている．これに対して，一般の 2×2 ユニタリー行列（必ずしもユニモジュラーとは限らない）の積の演算から定義される群は，U(2) と呼ばれている．最も一般的な 2 次元のユニタリー行列は，独立変数を 4 つ持ち，$e^{i\gamma}$（γ は実数）をユニタリー・ユニモジュラー行列にかけた形に表わされることを注意しておこう：

$$U = e^{i\gamma}\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix},$$
$$|a|^2 + |b|^2 = 1, \qquad \gamma^* = \gamma. \qquad (3.3.14)$$

すなわち，SU(2) は U(2) の**部分群**である．

回転を表現するのに O(3) を用いることも SU(2) を用いることもできるので，O(3) と SU(2) の群は同型である，すなわち O(3) の元と SU(2) の元との間に 1 対 1 の対応があると結論づけたくなるかも知れない．しかしこの推論は正しくない．角度 2π の回転と 4π の回転を比較して考えよう．O(3) では，2π の回転を表わす行列も 4π の回転を表わす行列も共に 3×3 の単位行列である．一方，SU(2) でそれらに対応する行列は，それぞれ

(－1)かける2×2の単位行列および単位行列そのものである．さらに一般に，$U(a, b)$と$U(-a, -b)$はO(3)で一つの3×3行列に対応する．したがって対応は2対1であり，与えられたRに対し，対応するUは2価であることが分かる．しかし二つの群は局所的に同型であるということはできる．

オイラーの回転

古典力学を学んでいる読者は，剛体の任意の回転が**オイラーの回転**と呼ばれる3段階の操作で実現できることを，よく知っているであろう．三つのオイラー角で指定されるオイラーの回転による記述は，3次元で最も一般的な回転を特徴づけるもう一つの方法である．

オイラーの回転の際の3段階とは次の通りである．まず，剛体をz-軸のまわりに角度αだけ反時計方向に（z-軸の正方向から見て）回転させる．ここで剛体にいわば埋め込まれたy-軸があると考えよう．z-軸回転を実行する前にこの剛体のy-軸は，**空間に固定されたy-軸**と呼ぶ通常のy-軸と一致していた．z-軸のまわりの回転後，明らかに剛体のy-軸は空間に固定されたy-軸と一致しない．そこで前者をy'-軸と呼ぶことにしよう．薄い円板に対してこの操作がどのように見えるかは，図3.4aを参照して欲しい．次に第2の回転を行う．今度はy'-軸のまわりに角度βだけ廻す．その結果，剛体のz-軸はもはや空間に固定されたz-軸の方向を向かなくなる．第2の回転後の剛体のz-軸を，z'-軸と呼ぼう．図3.4bを参照せよ．第3の最後の回転は，z'-軸のまわりに角度γだけ行う．剛体のy-軸はここで図3.4cのy''-軸になる．3×3の直交行列を用いて，この3つの回転の積は

$$R(\alpha, \beta, \gamma) \equiv R_{z'}(\gamma)\, R_{y'}(\beta)\, R_z(\alpha) \qquad (3.3.15)$$

と表わされる．

ここで一つ注意を述べるのがよいであろう．古典力学のほとんどの教科書では，第2の回転（真中の回転）を剛体のy-軸のまわりでなく剛体のx-軸のまわりで行うようである．（例えばGoldstein, 1980を見よ．）量子力学では

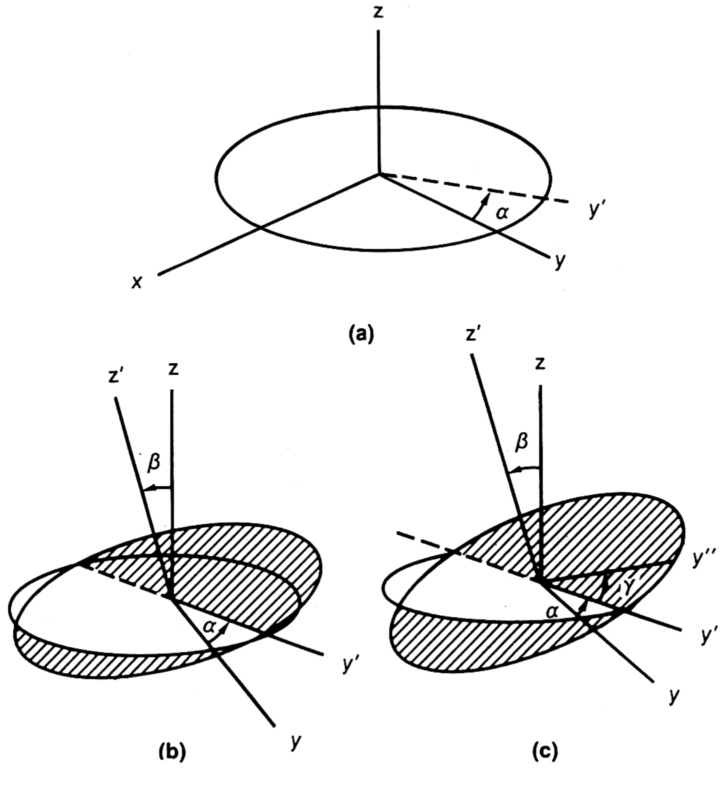


図 3.4.　オイラーの回転

すぐに明らかになる理由により，この慣習を避けている．

(3.3.15)式中に，剛体に固定された軸のまわりでの回転を表わす行列，$R_{y'}$ および $R_{z'}$ が現われている．オイラーの回転に用いたこの方法は，量子力学ではいささか不便である．以前簡単な表式を得たのは，空間に固定された（プライムのついていない）軸に関する $\boldsymbol{S}$ 演算子の成分であって，剛体の軸に関する成分に対してではなかったからである．そこで，剛体軸回転を，空間固定軸回転で表わすことが望まれる．幸いにして非常に簡単な関係式

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha)\, R_y(\beta)\, R_z^{-1}(\alpha) \qquad (3.3.16)$$

が存在する．右辺の意味は次の通りである．まず図3.4a の剛体の y-軸（すなわち y'-軸）を，z-軸のまわりに角度 α だけ時計方向（z-軸の正方向から見て）に廻して，空間に固定された元の y-軸に戻す．次に y-軸のまわりに角度 β だけ回転させる．最後に剛体の y-軸を，空間に固定された z-軸のまわり（z'-軸のまわりでない！）に角度 α だけ回転し y'-軸の方向に戻す．方程式(3.3.16)はこれらの回転の正味の結果が，y'-軸のまわりの角度 β のただ一度の回転であることを述べている．

この主張が正しいことを示すのに，(3.3.16)の両辺が図3.4a にある円板に与えた影響をさらに詳しく調べよう．明らかに剛体の y-軸はどちらの場合も変わりなく，y'-方向を向いている．その上剛体の z-軸の方向も，$R_{y'}(\beta)$を適用しようと $R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha)$を用いようと最終的に同じである．どちらであってもその軸は，固定された z-軸（もとの z-軸と同じ）と角度 β をなし，固定された座標系で測った方位角は，ちょうど α である．すなわち剛体の z-軸は最終的に，図3.4b の z'-軸と同じである．同じように

$$R_{z'}(\gamma) = R_{y'}(\beta)\, R_z(\gamma)\, R_{y'}^{-1}(\beta) \qquad (3.3.17)$$

が証明できる．

(3.3.16)と(3.3.17)を用いて，(3.3.15)を書きかえることができ次式が得られる：

$$\begin{aligned} &R_{z'}(\gamma)\, R_{y'}(\beta)\, R_z(\alpha) \\ &\quad = R_{y'}(\beta)\, R_z(\gamma)\, R_{y'}^{-1}(\beta)\, R_{y'}(\beta)\, R_z(\alpha) \\ &\quad = R_z(\alpha)\, R_y(\beta)\, R_z^{-1}(\alpha)\, R_z(\gamma)\, R_z(\alpha) \\ &\quad = R_z(\alpha)\, R_y(\beta)\, R_z(\gamma)\ . \end{aligned} \qquad (3.3.18)$$

最後の段階で，$R_z(\gamma)$と $R_z(\alpha)$が交換することを用いた．要約すると

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha)\, R_y(\beta)\, R_z(\gamma) \qquad (3.3.19)$$

となり，右辺の三つの行列はすべて固定された軸のまわりの回転を表わす．

ここでこの一組の演算を，量子力学のスピン1/2の系に対して適用しよう．(3.3.19) 式にある直交行列の積に対応して，このスピン1/2の系のケット空間に，回転演算子の積

$$\mathscr{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathscr{D}_z(\alpha)\,\mathscr{D}_y(\beta)\,\mathscr{D}_z(\gamma) \tag{3.3.20}$$

が存在する．この積を 2 × 2 の行列で表現すると，(3.2.45) を用いて

$$\begin{aligned}
&\exp\left(\frac{-i\sigma_3\alpha}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\sigma_2\beta}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\sigma_3\gamma}{2}\right)\\
&= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix}\\
&= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos(\beta/2) & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\sin(\beta/2) \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2}\sin(\beta/2) & e^{i(\alpha+\gamma)/2}\cos(\beta/2) \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.3.21}$$

となる．この行列は明らかにユニタリーでユニモジュラーの形をしている．逆に，最も一般的な 2 × 2 のユニタリー・ユニモジュラー行列は，このオイラー角を用いた形に表わすことができる．

第 2 の（真中の）回転，$\exp(-i\sigma_y\phi/2)$ の行列要素が実数であることに注目しよう．古典力学のほとんどの教科書で採られているように，この回転を y-軸のまわりでなく x-軸のまわりに選んだとすると，こうはならない．第 2 の回転は非対角要素を持つ唯一の回転行列だが，この行列要素を実数にしておきたい*．そのために量子力学では，我々のとった流儀にこだわるのである．

(3.3.21)式の 2 × 2 行列は，回転演算子 $\mathscr{D}(\alpha, \beta, \gamma)$ の $j=1/2$ 既約表現と呼ばれ，その行列要素を $\mathscr{D}^{(1/2)}_{m'm}(\alpha, \beta, \gamma)$ という記号で表わす．角運動量演算子を用いると

$$\mathscr{D}^{(1/2)}_{m'm}(\alpha, \beta, \gamma) = \left\langle j = \frac{1}{2},\ m' \right| \exp\left(\frac{-iJ_z\alpha}{\hbar}\right)$$

* もちろんこれは S_y（もっと一般には J_y）の行列要素を純虚数に取るという，本書で用いている約束による．

$$\times \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iJ_z\gamma}{\hbar}\right)\left| j=\frac{1}{2},\ m\right\rangle \qquad (3.3.22)$$

となる．3.5節で j が大きいときの(3.3.21)に対応する式をさらに調べよう．

3.4　密度演算子ならびに純粋アンサンブルと混合アンサンブル

偏極原子線と偏極していない原子線

今迄展開してきた量子力学の論理形式は，一つのアンサンブルすなわち全く同じように用意した物理系の集合に対して，統計的予測を行うものである．もっと正確にいうと，このようなアンサンブルではすべての要素が，同一の状態ケット $|\alpha\rangle$ で特徴づけられるとしている．このよい例は，SG フィルター装置から出て来た銀原子線である．原子線中のすべての原子は，フィルター装置の不均一磁場によって決まる同一方向に，スピンを向けている．ところで物理系のアンサンブルで，例えばその中の60％が $|\alpha\rangle$ のケットで残りの40％が別の $|\beta\rangle$ のケットで特徴づけられるものもある．このようなアンサンブルを量子力学的にどのように記述するかは，未だ議論していない．

今迄展開してきた論理形式が不完全であることをまざまざと示すために，熱い炉から出たばかりでこれからシュテルン・ゲルラッハ型のフィルター装置に入るという銀原子を考えよう．対称性を根拠に期待されるのは，これらの原子のスピンの向きが不規則なことである．いいかえればこのような原子の集まりに付随する特別な方向はありえない．今迄の議論ではスピン1/2の系の最も一般的な状態ケットは

$$|\alpha\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle \qquad (3.4.1)$$

で与えられる．この等式は，スピンの向きが不規則な原子の集まりを記述できるであろうか．答は明らかに否である；(3.4.1)が表わすのはある決まった方

向を向いたスピンの状態ケットである．すなわち $\hat{\boldsymbol{n}}$ の方向であり，その z-軸となす角 β と方位角 α は

$$\frac{c_+}{c_-}=\frac{\cos(\beta/2)}{e^{i\alpha}\sin(\beta/2)} \tag{3.4.2}$$

を解いて得られる．(3.2.52)を見よ．

このような場合をうまく扱うのに，**分布の割合**あるいは確率の重みという概念を導入する．スピンの向きが全く不規則な銀原子のアンサンブルは，その中の50%が $|+>$ で表わされ，残りの50%が $|->$ で表わされる銀原子の集まりと見なすことができる．このようなアンサンブルを明記するのに，w_+ と w_- をそれぞれ，スピンが上向きと下向きの分布の割合として

$$w_+=0.5\ ,\qquad w_-=0.5 \tag{3.4.3}$$

で指定することしよう．このような原子線には特に決まった方向があるわけでないので，同じ集合を全く同等に $|S_x;+>$ と $|S_x;->$ が50対50で混合していると見なすこともできるであろう．こうした記述に必要な数学的方法を，すぐあとに述べる．

ここで導入したのが単に2つの実数 w_+，w_- であることに注意を払うのは，非常に重要なことである．上向きスピンと下向きスピンのケット間の相対的な位相について，何の情報もない．このような状況をよく，スピンが上向きのケットとスピンが下向きの状態の**インコヒーレントな混合**と呼ぶ．ここで行っていることを，先に学んだコヒーレントな線形結合，例えば

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)|+>+\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)|-> \tag{3.4.4}$$

と，はっきり区別しなければならない．後者では $|+>$ と $|->$ の位相関係に，xy-平面でのスピンの向き，この場合には x-軸の正方向という重要な情報が含まれている．一般に w_+ と w_- を $|c_+|^2$ と $|c_-|^2$ と混同してはいけない．w_+

と w_- に含まれる確率の概念は，古典的な確率論に表われる概念に大変近い．熱い炉から出てきたばかりの銀原子を扱うとき遭遇する状況は，50％の大学院生が男子で，残りの50％が女子の大学院のクラスと比較できるかも知れない．でたらめに1人の学生を選んだとすると，その指名された学生が男子（または女子）である確率は0.5である．1人の学生が，位相関係の決まった男子と女子のコヒーレントな線形結合で表わされるなどとは，誰も聞いたことがないであろう．

炉から出たばかりの銀原子線は，**完全にランダムなアンサンブル**の一例である．スピンの向きにこれという方向がないので，この原子線は**偏極していない**という．これに対して選択的シュテルン・ゲルラッハ型の測定を通ってきた原子線は，**純粋アンサンブル**の例である．このアンサンブルのすべての要素は，ある決まった方向を向いたスピンの状態を記述する一つの共通のケットにより表わされるので，原子線は**偏極している**といわれる．完全にランダムなアンサンブルと純粋アンサンブルとの違いをはっきりさせるために，回転可能な SG 装置を考えよう．この装置を回転させると，不均一な磁場 $\boldsymbol{B}$ の方向を変えることができる．炉から出たばかりの全く偏極していない原子線がこのような装置を通ると，装置がどの方向を向いていてもいつも2本の原子線が同じ強度で出てくる．これに対して偏極した原子線がこのような装置を通ると，出てくる2本の原子線の相対強度は装置を回転させると変わる．ある特別な方向に対しては，強度比が本当に1対0になる．実際，第1章で展開した理論を用いると，原子スピンの方向と SG 装置の不均一磁場の方向とのなす角度を β として，この相対強度は $\cos^2(\beta/2)$ と $\sin^2(\beta/2)$ となる．

完全にランダムなアンサンブルと純粋なアンサンブルとは，**混合アンサンブル**と呼ばれるものの両極端な場合と考えられる．混合アンサンブルでは，要素のある割合——例えば70％——が状態ケット $|\alpha>$ で，残りの30％が $|\beta>$ であらわされる．このような場合に原子線は，**部分的に偏極している**といわれる．ここで $|\alpha>$ と $|\beta>$ は直交している必要さえない．例えばスピンが正の x-方向に向いているものが70％でスピンが負の z-方向に向いているものが

30%であることもできる*.

アンサンブル平均と密度演算子

ここで1927年にJ. フォン・ノイマンによって提唱された，密度行列の理論を紹介しよう．この理論は混合アンサンブルの物理的状況も純粋アンサンブルの状況をも，定量的に記述する．我々の述べる一般的議論は，スピン1/2の系に限定するものではないが，説明を分かり易くするために繰り返しスピン1/2の系に戻って考えることにしよう．

純粋アンサンブルはその定義からして，すべての構成要素が同じケット $|\alpha>$ で特徴づけられる物理系の集まりである．これに対し混合アンサンブルでは，構成要素の w_1 の割合の部分は $|\alpha^{(1)}>$ で特徴づけられ，別の w_2 の割合の部分は $|\alpha^{(2)}>$ で表わされる，という具合になる．大雑把にいうと混合アンサンブルは，その名が示すように純粋アンサンブルの混合として見ることができる．分布の割合は，規格化条件

$$\sum_i w_i = 1 \tag{3.4.5}$$

を満たさなければならない．前に述べたように $|\alpha^{(1)}>$ と $|\alpha^{(2)}>$ が，直交している必要はない．さらに，(3.4.5)の i での和の項数が，ケット空間の次元と一致する必要はなく，N をこえることもよくある．例えば，$N=2$ のスピン1/2の系に対して，40%はスピンが z-軸の正方向を向き，30%はスピンが x-軸の正方向を向き，残りの30%はスピンが y-軸の負方向を向いていると考えて差しつかえない．

ある観測量 A の測定を，混合アンサンブルで行うことにしよう．測定を多数回行ったとき，A の測定値の平均がいくらになるか問題にする．その

---

* 他の本では我々が純粋ないし混合アンサンブルと呼ぶものを，しばしば純粋ないし混合状態といっている．しかしこの教科書で状態という用語は，物理系がある決まった状態ケット $|\alpha>$ で表わされている場合に用いる．

答は次式で定義される A の**アンサンブル平均**

$$\left[A \right] \equiv \sum_i w_i < \alpha^{(i)} | A | \alpha^{(i)} > = \sum_i \sum_{a'} w_i | < a' | \alpha^{(i)} > |^2 a' \qquad (3.4.6)$$

で与えられる．ここで $| a' >$ は A の固有ケットである．$< \alpha^{(i)} | A | \alpha^{(i)} >$ は状態 $| \alpha^{(i)} >$ に関して取った，A の通常の量子力学的期待値であることを思い出そう．等式(3.4.6)はこれらの期待値に，さらに対応する分布の割合 w_i を重みとしてかけなければならないことを示している．確率的概念が二度入っているところに注意しよう．第1に $| < a' | \alpha^{(i)} > |^2$ であり，状態 $| \alpha^{(i)} >$ が A の固有状態 $| a' >$ に見出される量子力学的確率である．第2に確率因子 w_i であり，アンサンブルの中に $| \alpha^{(i)} >$ で表わされる量子力学的状態を見出す確率である*.

アンサンブル平均(3.4.6)を，もっと一般的な基底 $\{ | b' > \}$ を用いて書き直すことができる：

$$\left[A \right] = \sum_i w_i \sum_{b'} \sum_{b''} < \alpha^{(i)} | b' > < b' | A | b'' > < b'' | \alpha^{(i)} >$$
$$= \sum_{b'} \sum_{b''} \left(\sum_i w_i < b'' | \alpha^{(i)} > < \alpha^{(i)} | b' > \right) < b' | A | b'' >. \qquad (3.4.7)$$

上式で $b'(b'')$ の和に含まれる項の数はケット空間の次元数であり，i の和に含まれる項の数は，混合アンサンブルが純粋アンサンブルのどのような混合であるかに依っている．上の形では特定の観測量 A に依らない，アンサンブルの基本的性質を示す因子がかっこでくくり出されていることに注目しよう．これをもとに**密度演算子** ρ を

* 他の本ではしばしば，アンサンブル平均を期待値とも呼んでいる．だがこの教科書では期待値という用語を，もっぱら純粋アンサンブルで測定を実施したときの平均測定値を表わすためにとっておく．

$$\rho \equiv \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}| \tag{3.4.8}$$

のように定義する．対応する**密度行列**の要素は

$$\langle b''|\rho|b'\rangle = \sum_i w_i \langle b''|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|b'\rangle \tag{3.4.9}$$

の形である．密度演算子は，問題にしているアンサンブルに関して我々の持つことのできる物理的に重要な情報をすべて含んでいる．表式(3.4.7)に戻るとアンサンブル平均が

$$\begin{aligned}\left[A\right] &= \sum_{b'}\sum_{b''}\langle b''|\rho|b'\rangle\langle b'|A|b''\rangle \\ &= \mathrm{tr}(\rho A)\end{aligned} \tag{3.4.10}$$

のように書かれることが分かる．トレースは表示に依らないから，$\mathrm{tr}(\rho A)$は都合のよい基底を用いて計算することができる．その結果，(3.4.10)は非常に強力な関係式となる．

密度演算子には特筆すべき性質が二つある．第1に密度演算子は(3.4.8)から明らかなようにエルミート的である．第2に密度演算子は規格化条件

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(\rho) &= \sum_i\sum_{b'} w_i\langle b'|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|b'\rangle \\ &= \sum_i w_i\langle\alpha^{(i)}|\alpha^{(i)}\rangle = 1\end{aligned} \tag{3.4.11}$$

を満足する．

エルミート性と規格化条件のために，次元数2のスピン1/2の系では，密度演算子あるいは対応する密度行列が3個の独立な実数パラメータで表わされる．2×2のエルミート行列は4個の実数で書けるが，規格化条件によりその中の3個のみが独立である．必要な3個の数は$[S_x]$，$[S_y]$および$[S_z]$である．読者はこの3個のアンサンブル平均が，密度演算子を再構成するのに十分であ

ることを確かめられるであろう．一般に混合アンサンブルが形成される様子は，もっとこみ入っていることがある．あらゆる $|\alpha^{(i)}>$ で特徴づけられる純粋アンサンブルを，適当な w_i をつけて混ぜ合せてもよい．しかしスピン1/2の系では，問題にするアンサンブルを3個の実数が完全に特徴づける．これは，混合アンサンブルが多くの異なった方法で純粋アンサンブルに分解できることを，強く示唆している．この点を説明する問題が一つ，この章の終りにある．

純粋アンサンブルはある $|\alpha^{(i)}>$ —— 例えば $i=n$ とする —— に対して $w_i=1$ とし，他のあらゆる状態ケットに対して $w_i=0$ とすることで定められる．したがって対応する密度演算子は

$$\rho=|\alpha^{(n)}><\alpha^{(n)}| \tag{3.4.12}$$

のように和のない形に書かれる．明らかに純粋アンサンブルの密度演算子は，べき等（idempotent），すなわち

$$\rho^2=\rho \tag{3.4.13}$$

であり，これは

$$\rho(\rho-1)=0 \tag{3.4.14}$$

と同値である．したがって純粋アンサンブルに対してのみ，(3.4.11)に加えて

$$\mathrm{tr}(\rho^2)=1 \tag{3.4.15}$$

が成り立つ．純粋アンサンブルの密度演算子の固有値は，エルミート演算子 ρ を対角化する基底ケットの完全系を，(3.4.14)式の ρ と $(\rho-1)$ の間にはさむと分かるように，0または1である．したがって対角化すると純粋アンサンブルの密度行列は，かならず

$$\rho \doteq \begin{pmatrix} 0 & & & & & & & & & \mathbf{0} \\ & 0 & & & & & & & & \\ & & 0 & & & & & & & \\ & & & \ddots & & & & & & \\ & & & & 0 & & & & & \\ & & & & & 1 & & & & \\ & & & & & & 0 & & & \\ & & & & & & & 0 & & \\ & & & & & & & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & & & & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{対角型}) \tag{3.4.16}$$

のように表わされる．アンサンブルが純粋のときに $\mathrm{tr}(\rho^2)$ は最大となることを示すことができる．混合アンサンブルでは，$\mathrm{tr}(\rho^2)$ は1より小さい正の数である．

密度演算子が与えられたとき，対応する密度行列をある指定された基底でどのように構成するか調べよう．このためにまず

$$|\alpha><\alpha| = \sum_{b'}\sum_{b''}|b'><b'|\alpha><\alpha|b''><b''| \tag{3.4.17}$$

となることを思い出そう．これを用いると $|\alpha^{(i)}><\alpha^{(i)}|$ に対応する正方行列は，$<b'|\alpha^{(i)}>$ で作られる列と $<\alpha^{(i)}|b''>$（これはもちろん $<b''|\alpha^{(i)}>^*$ に等しい）で作られる行とを外積の意味で結合して作ることができる．
最後に，このような正方行列に (3.4.8) にあるような重みの因子 w_i をかけて，加えあわせる．最終的な形は予想通り，(3.4.9)と一致する．

すべてスピン1/2の系に関してであるが，いくつかの例を調べるのは有益であろう．

例1．S_z+ の完全に偏極したビーム．

$$\rho = |+><+| \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1,\ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.4.18}$$

例 2．$S_x\pm$ の完全に偏極したビーム．

$$\begin{aligned}\rho &= |S_x;\pm\rangle\langle S_x;\pm| \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|+\rangle\pm|-\rangle)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(\langle+|\pm\langle-|) \\ &\doteq \begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \pm\frac{1}{2}\\ \pm\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{3.4.19}$$

例 1 と例 2 のアンサンブルは，共に純粋である．

例 3．偏極していないビーム．これは上向きスピンのアンサンブルと下向きスピンのアンサンブルとが，同じ比率（それぞれ50%）でインコヒーレントに混合したものとみなせる：

$$\begin{aligned}\rho &= \left(\frac{1}{2}\right)|+\rangle\langle+| + \left(\frac{1}{2}\right)|-\rangle\langle-| \\ &\doteq \begin{pmatrix}\frac{1}{2} & 0\\ 0 & \frac{1}{2}\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{3.4.20}$$

これはちょうど，単位行列を 2 で割ったものである．以前注意したように同じアンサンブルを，S_x+ のアンサンブルと S_x- のアンサンブルを同じ比率でインコヒーレントに混合したものともみなせる．よくできていることに，我々の式はこの期待を自動的に満たしている：

$$\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & 0\\ 0 & \frac{1}{2}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}. \tag{3.4.21}$$

この右辺の 2 項は，S_x+ と S_x- の純粋アンサンブルの密度行列であることが，例 2 から分かる．この場合の ρ はちょうど恒等演算子を 2（次元数）で割っ

たものであるから，S_kがトレイスレスであることを使うと

$$\mathrm{tr}(\rho S_x) = \mathrm{tr}(\rho S_y) = \mathrm{tr}(\rho S_z) = 0 \tag{3.4.22}$$

が得られる．そこで $\boldsymbol{S}$ のアンサンブル平均として

$$\left[\, \boldsymbol{S} \,\right] = 0 \tag{3.4.23}$$

が成り立つ．スピン1/2の系の完全にランダムなアンサンブルには，向きやすいスピンの方向が特にないので，(3.4.23) はもっともな結果である．

例 4．部分的に偏極している原子線の例として，S_z+ と S_x+ の二つの純粋アンサンブルが 75 対 25 に混合している場合を考えよう：

$$w(S_z+) = 0.75, \qquad w(S_x+) = 0.25. \tag{3.4.24}$$

対応する ρ は

$$\begin{aligned} \rho &\doteq \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{7}{8} & \frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{8} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{3.4.25}$$

と表わすことができ，これより

$$\left[\, \mathrm{S}_x \,\right] = \frac{\hbar}{8}, \quad \left[\, S_y \,\right] = 0, \quad \left[\, S_z \,\right] = \frac{3\hbar}{8} \tag{3.4.26}$$

が導かれる．このアンサンブルが(3.4.24)とは異なる仕方で分割できることを示すのは，読者の演習に残しておこう．

アンサンブルの時間的発展

密度演算子 ρ は，時間の関数としてどのように変化するであろうか．ある時刻 t_0 で，密度演算子が

$$\rho(t_0)=\sum_i w_i|\alpha^{(i)}><\alpha^{(i)}| \tag{3.4.27}$$

により与えられたとする．アンサンブルがかき乱されない限り，分布の割合 w_i を変化できない．したがって ρ の変化は，もっぱら状態ケット $|\alpha^{(i)}>$ の時間的発展に支配される：

$$t_0\text{における}\quad |\alpha^{(i)}>\longrightarrow|\alpha^{(i)},t_0;t>. \tag{3.4.28}$$

$|\alpha^{(i)},t_0;t>$ がシュレーディンガー方程式を満足することから

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}&=\sum_i w_i\Big(H|\alpha^{(i)},t_0;t><\alpha^{(i)},t_0;t| \\ &\qquad -|\alpha^{(i)},t_0;t><\alpha^{(i)},t_0;t|H\Big) \\ &=-[\rho,\ H] \end{aligned} \tag{3.4.29}$$

が得られる．これはハイゼンベルクの運動方程式のように見えるが，符号が逆である！ しかし ρ はハイゼンベルク表示の力学的観測量でないので，これは別に困ったことでない．実際 ρ を構成しているのは，シュレーディンガー方程式に従って時間的発展をする，シュレーディンガー表示の状態ケットと状態ブラなのである．

興味深いことに(3.4.29)は，古典統計力学におけるリューヴィユ定理

$$\frac{\partial\rho_{\text{古典}}}{\partial t}=-\Big[\rho_{\text{古典}},H\Big]_{\text{古典}} \tag{3.4.30}$$

の量子力学版と見なすことができる．ここで $\rho_{\text{古典}}$ は位相空間内の代表点の密

度を表わす*．(3.4.29)に現われている ρ が密度演算子という名前であるのは，こうした事情からまことに適切である．ある観測量 A のアンサンブル平均を与える(3.4.10) に対応する古典論の式は

$$A_{平均} = \frac{\int \rho_{古典} A(q,p) d\Gamma_{q,p}}{\int \rho_{古典} d\Gamma_{q,p}} \tag{3.4.31}$$

である．ここで $d\Gamma_{q,p}$ は位相空間の体積要素を表わす．

連続的な場合への一般化

今迄は，ある観測量の離散的固有値によって基底ケットが指定されるケット空間で，密度演算子を考えてきた．密度行列の概念は，用いる基底ケットが連続的固有値で指定される場合にも一般化できる．特に位置の固有ケット $|\boldsymbol{x}'\rangle$ で張られるケット空間を考えよう．(3.4.10)に対応する式は

$$\left[A \right] = \int d^3x' \int d^3x'' \langle \boldsymbol{x}''|\rho|\boldsymbol{x}'\rangle \langle \boldsymbol{x}'|A|\boldsymbol{x}''\rangle \tag{3.4.32}$$

で与えられる．この密度行列は実際，$\boldsymbol{x}'$ と $\boldsymbol{x}''$ の関数すなわち

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{x}''|\rho|\boldsymbol{x}'\rangle &= \langle \boldsymbol{x}''|\left(\sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}| \right)|\boldsymbol{x}'\rangle \\ &= \sum_i w_i \psi_i(\boldsymbol{x}'') \psi_i^*(\boldsymbol{x}')\end{aligned} \tag{3.4.33}$$

であり，ここで ψ_i は状態ケット $|\alpha^{(i)}\rangle$ に対応する波動関数である．この対角要素（すなわち $\boldsymbol{x}'=\boldsymbol{x}''$）が，まさに重みをかけた確率密度の和であることに注目しよう．このことからもまた，密度行列という用語がまことに適切であることが分かる．

---

* 古典的な純粋状態は，位相空間内の運動する1点($q_1, \cdots\cdots, q_f, p_1, \cdots\cdots, p_f$)により時々刻々表わされる状態であることを思い出そう．一方，古典的な統計的状態は負にならない密度関数 $\rho_{古典}$ ($q_1, \cdots\cdots, q_f, p_1, \cdots\cdots, p_f, t$)により記述され，系が時刻 t に区間 $dq_1, \cdots\cdots, dp_f$ に見出される確率が $\rho_{古典} dq_1, \cdots\cdots dp_f$ となる．

連続的な場合にも，同じ混合アンサンブルを幾通りもの方法で純粋アンサンブルに分解できることに留意するのは重要である．例えば“実際の”粒子線を平面波状態（単一エネルギーの自由粒子状態）の混合と見なすことも，波束状態の混合と見なすこともできるのである．

量子統計力学

この節の終りに，密度演算子の理論と統計力学の関連について，少し議論しよう．はじめに，完全にランダムなアンサンブルと純粋アンサンブルの持ついくつかの性質を記す．完全にランダムなアンサンブルの密度行列は，どのような表示でも

$$\rho \doteq \frac{1}{N}\begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & \\ 0 & & & & 1 \end{pmatrix} \tag{3.4.34}$$

のような形をとる[例 3 の (3.4.20)を参照]．これは，密度行列を書き表わすのに用いられる基底ケットに対応するすべての状態に，系が等しく分布しているという事実から導かれる．一方，ρ を対角化する基底では，純粋アンサンブルに対する密度演算子の行列表現は(3.4.16)である．二つの対角行列，(3.4.34)と(3.4.16)は共に規格化の要請(3.4.11)を満たし，大して異なっては見えない．存在する劇的な差異を特徴づける量を，何とかして作ることが望ましい．

そこで σ と書かれる量を

$$\sigma = -\mathrm{tr}(\,\rho \ln \rho\,) \tag{3.4.35}$$

で定義する．演算子 ρ の対数というと，恐しく思えるかもしれないが，ρ を対角的にする基底を用いると，(3.4.35) の意味は全くあいまいなところがなくなる．

$$\sigma = -\sum_k \rho_{kk}^{(\text{対角的})} \ln \rho_{kk}^{(\text{対角的})} \tag{3.4.36}$$

各要素 $\rho_{kk}^{(\text{対角的})}$ は0から1までの実数なので，σ は必然的に半正値（負でない実数）である．完全にランダムなアンサンブル（3.4.34）に対しては

$$\sigma = -\sum_{k=1}^{N} \frac{1}{N} \ln\left(\frac{1}{N}\right) = \ln N \tag{3.4.37}$$

が成り立つ．これと対照的に純粋アンサンブル(3.4.16)に対しては

$$\sigma = 0 \tag{3.4.38}$$

である．ここで(3.4.36)の各項が

$$\rho_{kk}^{(\text{対角的})} = 0 \quad \text{または} \quad \ln \rho_{kk}^{(\text{対角的})} = 0 \tag{3.4.39}$$

であることを用いた．

ここで σ には，無秩序さを量的に表わす度合という物理的な意味があることを述べよう．純粋アンサンブルは，すべての構成要素が同じ量子力学的状態ケットで特徴づけられるので，最大限に秩序があるアンサンブルである．これはよく編制された軍隊での兵隊の行進にたとえられよう．(3.4.38)によると，こうしたアンサンブルでは σ がゼロになる．もう一方の極限である完全にランダムなアンサンブルでは，すべての量子力学的状態が平等に可能なので，勝手な方向に歩き回る酔っ払った兵隊にたとえられよう．(3.4.37)に従うと σ は大きい．実際，後で示すように規格化条件

$$\sum_k \rho_{kk} = 1 \tag{3.4.40}$$

の下で σ の取りうる最大値が $\ln N$ である．

熱力学で学ぶように**エントロピー**と呼ばれる量は，不規則性の度合である．我々の σ は，アンサンブルの構成要素あたりのエントロピー S と

$$S = k\,\sigma \tag{3.4.41}$$

の関係で関連していることが分かる．ここで k は普遍定数で，ボルツマン定数と同一である．事実，(3.4.41)を量子統計力学におけるエントロピーの定義と考えることもできる．

次に熱平衡にあるアンサンブルに対して，密度演算子 ρ がどのように得られるかを示そう．我々のたてる基本的仮定として，自然は σ を最大にしようとすることを用いる．ただしハミルトニアンのアンサンブル平均が，ある指定された値にあるという制限をつける．この仮定を証明するには，環境との相互作用の結果どのように平衡が達成されるかという微妙な議論が必要となり，本書の範囲を越えてしまう．ともかく一たび熱平衡が達成すると

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \tag{3.4.42}$$

が期待できる．(3.4.29)によりこれは ρ と H が同時に対角化されることを示している．そこで(3.4.36)を書くのに用いるケットとして，エネルギーの固有ケットをとることができる．このように選ぶと ρ_{kk} は，エネルギー固有値 E_k を持つエネルギー固有状態の分布の割合を表わす．

σ を最大にするために

$$\delta\,\sigma = 0 \tag{3.4.43}$$

を要請しよう．しかしここで，H のアンサンブル平均がある指定された値を持つという制限を考慮しなければならない．統計力学の言葉では $[H]$ は U と書かれ，構成要素あたりの内部エネルギーと同一である：

$$\left[\, H \,\right] = \mathrm{tr}\,(\rho H) = U. \tag{3.4.44}$$

さらに規格化の制限(3.4.40)を忘れてはならない．すると我々の基本的課題は，二つの制限

$$\delta\left[\, H \,\right] = \sum_k \delta\rho_{kk} E_k = 0 \tag{3.4.45a}$$

および

$$\delta(\mathrm{tr}\rho)=\sum_k \delta\,\rho_{kk}=0 \tag{3.4.45b}$$

のもとで，(3.4.43)を要請することになる．これはラグランジュの未定係数を用いて，最も簡単に達成できる．すなわち

$$\sum_k \delta\,\rho_{kk}\Big[\,(\ln\rho_{kk}+1)+\beta E_k+\gamma\,\Big]=0 \tag{3.4.46}$$

が得られるが，任意の変化 $\delta\,\rho_{kk}$ に対して上式が成り立つのは

$$\rho_{kk}=\exp(-\beta E_k-\gamma-1) \tag{3.4.47}$$

であるときのみである．定数 γ は規格化条件(3.4.40)を用いると消去できて，最終的結果は

$$\rho_{kk}=\frac{\exp(-\beta E_k)}{\sum_l^N \exp(-\beta E_l)} \tag{3.4.48}$$

となる．この式はエネルギー固有値 E_k を持つエネルギー固有状態の，分布の割合をそのまま与える．以下いつでも，和は異なるエネルギー固有状態にわたってとるものと了解する．もし縮退があれば，同じエネルギー固有値の状態を加え合わさなくてはいけない．

密度行列要素(3.4.48)は，統計力学で**カノニカルアンサンブル**と呼ばれるアンサンブルを記述するのに用いられる．もし内部エネルギーの制限(3.4.45a)をつけないで σ を最大にしようとしたら，代わりに

$$\rho_{kk}=\frac{1}{N},\ (k\text{によらず}) \tag{3.4.49}$$

が得られたであろう．これは完全にランダムなアンサンブルを記述する密度行列要素である．(3.4.48)と(3.4.49)を比較すると，完全にランダムなアンサン

ブルは，カノニカルアンサンブルの $\beta \to 0$ の極限（物理的には高温の極限）とみなせることがわかる．

(3.4.48)の分母は，統計力学で用いる分配関数

$$Z = \sum_{k}^{N} \exp(-\beta E_k) \tag{3.4.50}$$

であることが分かる．これはまた

$$Z = \mathrm{tr}(e^{-\beta H}) \tag{3.4.51}$$

とも書ける．エネルギー状態を基底とした ρ_{kk} が（3.4.48）のように分かったので，密度演算子を

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \tag{3.4.52}$$

のように書くことができる．この最も基本的な等式から，すべてのことが導ける．任意の観測量 A のアンサンブル平均は直ちに

$$\begin{aligned} \left[A \right] &= \frac{\mathrm{tr}(e^{-\beta H}A)}{Z} \\ &= \frac{\left[\sum_{k}^{N} \langle A \rangle_k \exp(-\beta E_k) \right]}{\sum_{k}^{N} \exp(-\beta E_k)} \end{aligned} \tag{3.4.53}$$

と計算できる．特に構成要素あたりの内部エネルギーとして

$$U = \frac{\left[\sum_{k}^{N} E_k \exp(-\beta E_k) \right]}{\sum_{k}^{N} \exp(-\beta E_k)} = -\frac{\partial}{\partial \beta}(\ln Z) \tag{3.4.54}$$

が得られる．統計力学を学んだ学生なら，誰でもこの式をよく知っているであろう．

パラメータ β は温度 T と

$$\beta = \frac{1}{kT} \tag{3.4.55}$$

のように関係していて，k はボルツマン定数である．こう同定できることを，調和振動子のアンサンブル平均 $[H]$ と古典的極限での内部エネルギーに対して期待される値 kT とを比較して確認するのは教育的である．これは演習問題に残しておく．既に述べたように高温の極限でカノニカルアンサンブルは，すべてのエネルギー状態が平等に占められる完全にランダムなアンサンブルになる．逆に低温の極限($\beta \to \infty$)では(3.4.48)よりカノニカルアンサンブルは，基底状態のみが占められる純粋アンサンブルになる．

簡単な例として，z-方向の均一な磁場中にあるそれぞれ $e\hbar/2m_ec$ の磁気モーメントを持った，スピン1/2の系からなるカノニカルアンサンブルをとり上げて説明しよう．この問題を扱うためのハミルトニアンは，既に(3.2.16)で与えてある．H と S_z は交換するので，このカノニカルアンサンブルでは密度行列が S_z の基底で対角的である．したがって

$$\rho \doteq \frac{\begin{pmatrix} e^{-\beta\hbar\omega/2} & 0 \\ 0 & e^{\beta\hbar\omega/2} \end{pmatrix}}{Z} \tag{3.4.56}$$

であり，分配関数は

$$Z = e^{-\beta\hbar\omega/2} + e^{\beta\hbar\omega/2} \tag{3.4.57}$$

である．この式から

$$\begin{aligned} \left[S_x \right] &= \left[S_y \right] = 0, \\ \left[S_z \right] &= -\frac{\hbar}{2}\tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \end{aligned} \tag{3.4.58}$$

が計算できる．磁気モーメント成分のアンサンブル平均は，単に $[S_z]$ に e/m_ec をかけたものである．常磁性帯磁率 χ は

$$\left(\frac{e}{m_e c}\right)\left[\ S_z\ \right] = \chi\, B \tag{3.4.59}$$

から計算できる．こうして χ に対するブリルアンの公式

$$\chi = \left(\frac{|e|\,\hbar}{2m_e cB}\right)\tanh\left(\frac{\beta\,\hbar\,\omega}{2}\right) \tag{3.4.60}$$

に到達する．[訳注：$B\to 0$ なので $\chi=\mu^2/kT$　($\mu=$ 磁気モーメント).]

3.5　角運動量の固有値と固有状態

角運動量に関する今迄の議論は，もっぱら次元が $N=2$ であるスピン1/2の系に限られていた．これからの節ではもっと一般的な角運動量状態を学ぶ．このためにまず $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の固有値と固有ケットを調べ，角運動量演算子の行列要素の表現を導く．これらは1926年の M. ボルン，W. ハイゼンベルクおよび P. ヨルダンによる論文で，はじめて得られたものである．

交換関係とはしご演算子

これから行おうとすることのすべては，角運動量の交換関係式（3.1.20）から導ける．ここで J_i が無限小回転の生成演算子として定義されていることを思い出そう．この基本的な交換関係式から導ける，第一の重要な性質は

$$\boldsymbol{J}^2 \equiv J_xJ_x + J_yJ_y + J_zJ_z \tag{3.5.1}$$

で定義される新しい演算子 $\boldsymbol{J}^2$ が存在し，J_k のいずれとも交換することである：

$$\left[\ \boldsymbol{J}^2, J_k\ \right] = 0,\ (k=1,\ 2,\ 3). \tag{3.5.2}$$

これを証明するために，$k=3$ の場合を調べることにしよう：

$$\left[J_xJ_x+J_yJ_y+J_zJ_z, J_z\right]=J_x\left[J_x, J_z\right]+\left[J_x, J_z\right]J_x$$
$$+J_y\left[J_y, J_z\right]+\left[J_y, J_z\right]J_y$$
$$=J_x(-i\hbar J_y)+(-i\hbar J_y)J_x+J_y(i\hbar J_x)+(i\hbar J_x)J_y=0. \tag{3.5.3}$$

k が1や2の場合の証明には，添字を（1→2→3→1）と巡回的に置換すればよい．J_x，J_y，J_z は互いに交換しないので，その中の一つだけを $\boldsymbol{J}^2$ と同時に対角化される観測量として選び出すことができる．慣習により J_z をこの目的のために選ぶ．

ここで $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の同時固有ケットを求めよう．$\boldsymbol{J}^2$ と J_z の固有値をそれぞれ a，b と記す：

$$\boldsymbol{J}^2|a, b\rangle=a|a, b\rangle \tag{3.5.4a}$$

$$J_z|a, b\rangle=b|a, b\rangle \tag{3.5.4b}$$

a，b の取りうる値を決めるには，**はしご演算子**と呼ばれる非エルミート演算子

$$J_\pm\equiv J_x\pm iJ_y \tag{3.5.5}$$

を J_x と J_y の代りに用いるのが便利である．これらが交換関係

$$\left[J_+, J_-\right]=2\hbar J_z \tag{3.5.6a}$$

および

$$\left[J_z, J_\pm\right]=\pm\hbar J_\pm \tag{3.5.6b}$$

を満たすことは，(3.1.20) から容易に分かる．さらに，(3.5.2) の直接の結果として

$$\left[\boldsymbol{J}^2, J_\pm\right] = 0 \tag{3.5.7}$$

であることに注目しよう．

$J_\pm$の物理的意味は何であろうか．これに答えるために，J_zが$J_\pm|a, b>$に作用するとどうなるかを調べよう：

$$\begin{aligned} J_z(J_\pm|a, b>) &= ([J_z, J_\pm]+J_\pm J_z)|a, b> \\ &= (b \pm \hbar)(J_\pm|a, b>) \end{aligned} \tag{3.5.8}$$

が（3.5.6b）を用いて得られる．すなわちJ_+ (J_-) をJ_zの固有ケットにかけると，その結果得られるケットは依然としてJ_zの固有ケットであり，ただ固有値が $\hbar$ の 1 単位だけ増加（減少）しているのである．こういうわけで，J_z固有値の“はしご”を一段昇ったり（降りたり）させる$J_\pm$を，はしご演算子という名で呼んでいる．

話は少しそれるが（3.5.6b）の交換関係は，これまでの章で出会ったいくつかの交換関係を思い出させる．平行移動の演算子 $\mathscr{T}(\boldsymbol{l})$ を議論したときには

$$\left[x_i\ ,\ \mathscr{T}(\boldsymbol{l})\right] = l_i\mathscr{T}(\boldsymbol{l}) \tag{3.5.9}$$

であった．また調和振動子を議論したときは

$$[N,\ a^\dagger] = a^\dagger, \quad [N,\ a] = -a \tag{3.5.10}$$

であった．(3.5.9) も (3.5.10) も，(3.5.6b) と同様な構造をしていることが分かる．平行移動の演算子の物理的解釈は，それが位置演算子 $\boldsymbol{x}$ の固有値を $\boldsymbol{l}$ だけ変化させることであり，ちょうどはしご演算子の$J_\pm$がJ_zの固有値を $\hbar$ で 1 単位変えることと同じである．同様に振動子の生成演算子 $a^\dagger$は，個数の演算子 N の固有値を 1 だけ増やしている．

$J_\pm$はJ_zの固有値を $\hbar$ を単位として 1 だけ変化させるが，$\boldsymbol{J}^2$ の固有値

を変えない：

$$\boldsymbol{J}^2(J_\pm|a,\ b>) = J_\pm\boldsymbol{J}^2|a,\ b>$$
$$= a(J_\pm|a,\ b>)\ . \qquad (3.5.11)$$

ここで（3.5.7）を用いた．要約すると，$J_\pm|a,\ b>$ は $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の同時固有ケットであり，それぞれの固有値は a と $b\pm\hbar$ である．そこで

$$J_\pm|a,\ b> = c_\pm|a,\ b\pm\hbar> \qquad (3.5.12)$$

と表わせるが，比例定数 $c_\pm$ は，角運動量固有ケットの規格化の要請からあとで決めることにする．

$\boldsymbol{J}^2$ および J_z の固有値

角運動量の固有ケットを作り，その固有値スペクトルを研究するのに必要な準備が整った．$\boldsymbol{J}^2$ と J_z の同時固有ケットに，J_+ を次々と例えば n 回かけたとしよう．すると J_z の固有値は $n\hbar$ だけ増加しているが，$\boldsymbol{J}^2$ の固有値は不変であるような，$\boldsymbol{J}^2$ と J_z のもう一つの固有ケットが得られる．しかしながらこの過程は無限に続けられない．ある決まった a（$\boldsymbol{J}^2$ の固有値）に対し，b（J_z の固有値）には次のような上限があることが分かる：

$$a \geq b^2. \qquad (3.5.13)$$

この主張の正当性を証明するのに，まず

$$\boldsymbol{J}^2 - J_z^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+)$$
$$= \frac{1}{2}(J_+J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+) \qquad (3.5.14)$$

に着目する．ここで $J_+J_+^\dagger$ と $J_+^\dagger J_+$ は決して負にならない期待値を持たなければならない．なぜならば

$$J_+^\dagger|a,\ b> \overset{\text{DC}}{\leftrightarrow} <a,\ b|J_+\ ,$$
$$J_+|a,\ b> \overset{\text{DC}}{\leftrightarrow} <a,\ b|J_+^\dagger \tag{3.5.15}$$

の対応関係があるからである．これを用いると

$$<a,\ b|(\boldsymbol{J}^2 - J_z^2)\,|a,\ b> \geq 0 \tag{3.5.16}$$

となり，この式は（3.5.13）を意味する．したがって

$$J_+|a,\ b_{max}> = 0 \tag{3.5.17}$$

を満たす b_{max} がなければならない．いいかえると，b の固有値は b_{max} を越えて増加することができない．さて（3.5.17）は

$$J_-J_+\ |a\ ,\ b_{max}> = 0 \tag{3.5.18}$$

をも意味している．ここで

$$\begin{aligned} J_-J_+ &= J_x^2 + J_y^2 - i\,(J_yJ_x - J_xJ_y) \\ &= \boldsymbol{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z \end{aligned} \tag{3.5.19}$$

なので

$$(\boldsymbol{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)\,|a,\ b_{max}> = 0 \tag{3.5.20}$$

が成り立つ．しかし$|a,\ b_{max}>$自身は零ケットでないので，この関係式は

$$a - b^2{}_{max} - b_{max}\hbar = 0 \tag{3.5.21}$$

すなわち

$$a = b_{max}(b_{max} + \hbar) \tag{3.5.22}$$

であるときのみ可能となる．

同じようにして (3.5.13) をもとに議論をすすめると

$$J_-|a,\ b_{min}> = 0 \tag{3.5.23}$$

となるような b_{min} も必ず存在することがいえる. (3.5.19) との類推で J_+J_- を

$$J_+J_- = \boldsymbol{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \tag{3.5.24}$$

と書くことにより

$$a = b_{min}(b_{min} - \hbar) \tag{3.5.25}$$

が結論できる. (3.5.22) と (3.5.25) を比較すると, b_{max} を正として

$$b_{max} = -b_{min} \tag{3.5.26}$$

であること, および b の取りうる値が

$$-b_{max} \leq b \leq b_{max} \tag{3.5.27}$$

の間にあることが推論できる. $|a,\ b_{min}>$ に J_+ を次々と有限回かけると, $|a,\ b_{max}>$に達することができるに違いない. したがって

$$b_{max} = b_{min} + n\hbar \tag{3.5.28}$$

が, n をある整数として成立しなければならない. その結果

$$b_{max} = \frac{n\hbar}{2} \tag{3.5.29}$$

が得られる. 慣習に従い b_{max} の代りに $b_{max}/\hbar$ で定義される j を用いると

$$j = \frac{n}{2} \tag{3.5.30}$$

となる. J_z 固有値の最大値は $j\hbar$ であり, j は整数か半整数のどちらかである.

方程式（3.5.22）は $\boldsymbol{J}^2$ の固有値が

$$a = \hbar^2 j(j+1) \tag{3.5.31}$$

で与えられることを意味している．さらに m を

$$b \equiv m\hbar \tag{3.5.32}$$

で定義しよう．j が整数のときは，すべての m は整数である．j が半整数のとき，すべての m は半整数である．与えられた j に対して許される m の値は

$$m = \underbrace{-j,\ \ -j+1,\ \ \cdots\cdots,\ \ j-1,\ \ j}_{2j+1\ \text{個の状態}} \tag{3.5.33}$$

となる．

$\boldsymbol{J}^2$ と J_z の同時固有ケットを $|a,\ b>$ と書く代りに，$|j,\ m>$ と記す方がずっと便利である．すると基本的な固有値方程式は

$$\boldsymbol{J}^2|j, m> = j(j+1)\hbar^2|j, m> \tag{3.5.34a}$$

および

$$J_z|j, m> = m\hbar\,|j, m> \tag{3.5.34b}$$

と書ける．ここで j は整数ないし半整数で，m は（3.5.33）で与えられる．これらの結果を得るのに使ったのは交換関係式（3.1.20）のみであったことを，再び思い出すのは重要である．(3.5.34）式で明らかになっている角運動量の量子化は，角運動量の交換関係の直接の帰結であり，後者は回転の持つ特性と J_k が回転の生成演算子として定義されていることから導かれる．

角運動量演算子の行列要素

いろいろな角運動量演算子の行列要素を，詳しく調べよう．$|j,\ m>$ が規格化されているとすると，(3.5.34）から明らかに

$$<j', m'|\boldsymbol{J}^2|j, m> = j(j+1)\hbar^2\delta_{j'j}\delta_{m'm} \tag{3.5.35a}$$

および

$$<j', m'|J_z|j, m> = m\hbar\,\delta_{j'j}\delta_{m'm} \tag{3.5.35b}$$

が得られる．$J_\pm$の行列要素を得るには，まず

$$\begin{aligned}<j, m|J_+^\dagger J_+|j, m> &= <j, m|(\boldsymbol{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|j, m> \\ &= \hbar^2[\,j(j+1) - m^2 - m\,]\end{aligned} \tag{3.5.36}$$

を考える．ここで$J_+|j,\ m>$は（規格化された）$|j,\ m+1>$と比例定数を別にして等しい[（3.5.12）参照]．そこで

$$J_+|j, m> = c^+{}_{jm}\,|j, m+1> \tag{3.5.37}$$

と置き，（3.5.36）と比較すると

$$\begin{aligned}|c^+{}_{jm}|^2 &= \hbar^2[\,j(j+1) - m(m+1)] \\ &= \hbar^2(j-m)(j+m+1)\end{aligned} \tag{3.5.38}$$

が得られる．このようにしてc_{jm}^+を，任意の位相因子は別にして決めることができた．便宜上，ふつうc_{jm}^+を正の実数に選ぶ．すると

$$J_+|j, m> = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,\hbar\,|j, m+1> \tag{3.5.39}$$

となる．同様にして

$$J_-|j, m> = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,\hbar\,|j, m-1> \tag{3.5.40}$$

を導くことができる．最後に，$J_\pm$の行列要素が

$$<j', m'|J_\pm|j, m> = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\hbar\,\delta_{j'j}\delta_{m',m\pm1} \tag{3.5.41}$$

のように決まる．

回転演算子の表現

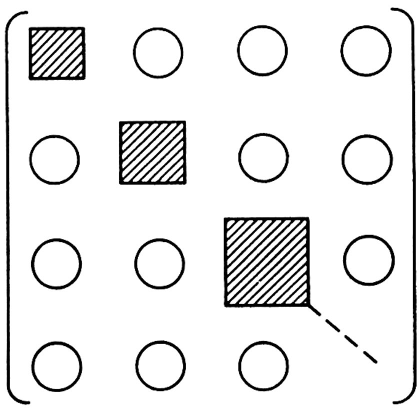
J_z と $J_\pm$ の行列要素を求め終ったので，次に回転演算子 $\mathscr{D}(R)$ の行列要素を調べよう．回転 R が，$\hat{\boldsymbol{n}}$ と ϕ で指定されるとき，その行列要素は

$$\mathscr{D}^{(j)}_{m'm}(R) = \langle j, m' | \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi}{\hbar}\right) | j, m\rangle \tag{3.5.42}$$

のように定義できる．この行列要素は量子力学における回転の群論的性質を先駆的に研究した E. P. ウィグナーにちなんで，**ウィグナー関数**と呼ばれることもある．ここで，(3.5.42) のケットとブラには同じ j の値が現われることに注意しよう．異なる j の値を持つ状態間の $\mathscr{D}(R)$の行列要素は，明らかにすべて消えるので考慮する必要がない．その理由は $\mathscr{D}(R)|j, m\rangle$ がやはり $\boldsymbol{J}^2$ の固有ケットであり，同じ固有値 $j(j+1)\hbar^2$ を持つからである：

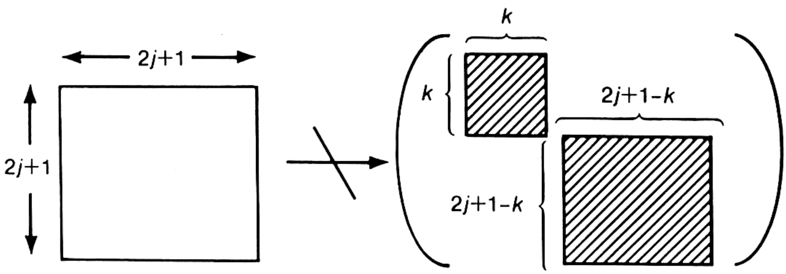
$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2\mathscr{D}(R)|j, m\rangle &= \mathscr{D}(R)\boldsymbol{J}^2|j, m\rangle \\ &= j(j+1)\hbar^2[\mathscr{D}(R)|j, m\rangle].\end{aligned} \tag{3.5.43}$$

この式は $\boldsymbol{J}^2$ が J_k と（したがって J_k の任意の関数と）交換する事実から導ける．簡単にいえば，回転は j の値を変えることができない．これはまことにもっともな結果である．



(3.5.44)

世の中ではよく，$\mathscr{D}^{(j)}_{m'm}(R)$により作られる$(2j+1)\times(2j+1)$行列を，回転演算子$\mathscr{D}(R)$の (2j+1) 次元の既約表現と呼んでいる．それは，必ずしも単一のjで特徴づけられないケット空間での任意の回転演算子に対応する行列が，基底を適当に選ぶと，対角線に沿って正方行列の並ぶ形 (3.5.44) (前頁) に変形できるからである．(3.5.44) で斜線をつけた四角は，$(2j+1)\times(2j+1)$の正方行列で，ある決ったjの値を持つ$\mathscr{D}^{(j)}_{m'm}$によって形づくられる．そしてまたそれぞれの正方行列自身は，どんな基底を選んでももっと小さな正方行列に区分けすることができない：



(3.5.45)

ある決まったjで特徴づけられる回転行列は，群を作る．第1に，恒等行列はこの群の元である．回転しないこと ($\phi=0$) に対応する回転行列は，$(2j+1)\times(2j+1)$の恒等行列であるからである．次に逆行列もまた，元である．これは回転軸$\hat{\boldsymbol{n}}$を変えずに単に回転角を逆 ($\phi\rightarrow-\phi$) にしたものである．第3に任意の二つの元の積もまた元である．具体的に書くと

$$\sum_{m'}\mathscr{D}^{(j)}_{m''m'}(R_1)\mathscr{D}^{(j)}_{m'm}(R_2)=\mathscr{D}^{(j)}_{m''m}(R_1R_2) \tag{3.5.46}$$

であり，積R_1R_2は単一の回転を表わす．回転行列は，対応する回転演算子がユニタリーなので，ユニタリー行列になることも記しておこう．具体的に書くと

$$\mathscr{D}_{m'm}(R^{-1})=\mathscr{D}^{*}_{mm'}(R) \tag{3.5.47}$$

が成り立つ．

回転行列の物理的意味を理解するために，$|j,\ m>$で表わされる状態から出発し，これを回転させる：

$$|j, m> \ \rightarrow \ \mathscr{D}(R)|j, m>. \tag{3.5.48}$$

この回転操作により j は変わらないが，一般に始めの m とは異なる m の値を持つ状態が得られる．$|j,\ m'>$に見出される振幅を求めるために，回転後の状態を次のように展開する：

$$\begin{aligned}\mathscr{D}(R)|j, m> &= \sum_{m'}|j, m'><j, m'|\mathscr{D}(R)|j, m>\\ &= \sum_{m'}|j, m'>\mathscr{D}^{(j)}_{m'm}(R).\end{aligned} \tag{3.5.49}$$

ここで完備性の関係式を用いる際に，$\mathscr{D}(R)$が同じ j の状態のみを結びつけることを利用した．したがって行列要素 $\mathscr{D}^{(j)}_{m'm}(R)$とはまさに，回転前の初めの状態が$|j,m>$で与えられたときに，回転後の状態が$|j,m'>$に見出される振幅である．

3.3節でオイラー角が最も一般的な回転を特徴づけるのに用いられる様子を見てきた．ここで任意の j（必ずしも1/2でない）に対して，(3.3.20)が行列では実際にどのように表わされるかを考えよう：

$$\begin{aligned}\mathscr{D}^{(j)}_{m'm}(\alpha,\ \beta,\ \gamma) &= <j, m'|\exp\left(\frac{-iJ_z\alpha}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iJ_z\gamma}{\hbar}\right)|j, m>\\ &= e^{-i(m'\alpha+m\gamma)}<j, m'|\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j, m>.\end{aligned} \tag{3.5.50}$$

この式で自明でない部分は，中央にある異なる m の値を混合する，y-軸のまわりの回転であることに注意しよう．新しい行列 $d^{(j)}(\beta)$を

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) \equiv <j, m'|\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j, m> \tag{3.5.51}$$

で定義すると便利である．

最後にいくつかの例に移ろう．$j=1/2$の場合は，既に3.3節で十分調べてある．(3.3.21) の中央の行列を見て

$$d^{(1/2)}=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\end{pmatrix} \tag{3.5.52}$$

が得られる．次に簡単な $j=1$ の場合を，少し詳しく考える．明らかにまず J_y の 3×3 行列による表現を求めなければならない．$J_\pm$を定義する等式 (3.5.5) によって

$$J_y=\frac{J_+-J_-}{2i} \tag{3.5.53}$$

となるので，(3.5.41) を用いると

$$J_y^{(j=1)}=\frac{\hbar}{2}\overset{\begin{matrix}m=1 & m=0 & m=-1\end{matrix}}{\begin{pmatrix}0 & -\sqrt{2}i & 0\\ \sqrt{2}i & 0 & -\sqrt{2}i\\ 0 & \sqrt{2}i & 0\end{pmatrix}}\begin{matrix}m'=1\\ m'=0\\ m'=-1\end{matrix} \tag{3.5.54}$$

が得られる．次に行うべきことは $\exp(-iJ_y\beta/\hbar)$ のテイラー展開である．$j=1/2$の場合と違い，$[J_y^{(j=1)}]^2$は 1 と $J_y^{(j=1)}$とでは表わすことができない．しかし容易に分かるように

$$\left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^3=\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar} \tag{3.5.55}$$

が成り立つ．その結果 $j=1$ に限っては

$$\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)\to 1-\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2(1-\cos\beta)-i\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)\sin\beta \tag{3.5.56}$$

の置きかえが許される．この式を詳しく確かめるのは読者にまかせる．最後の結果を具体的に書くと

$$d^{(1)}(\beta)=\begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\cos\beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \frac{1}{2}(1-\cos\beta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \cos\beta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta \\ \frac{1}{2}(1-\cos\beta) & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \frac{1}{2}(1+\cos\beta) \end{pmatrix} \qquad (3.5.57)$$

となる．

明らかにこの方法では j が大きいとき，大変時間がかかる．3.8節で $d^{(j)}_{m'm}(\beta)$ を得るためのもっと易しい方法を任意の j に対して学ぶことにしよう．

3.6　軌道角運動量

我々は角運動量の概念を，無限小回転の生成演算子として定義することによって導入した．スピン角運動量がゼロであるか無視できる時には，角運動量の問題に取り組む別の手法がある．このとき1粒子の角運動量 $\boldsymbol{J}$ は

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p} \qquad (3.6.1)$$

で定義される軌道角運動量と一致する．この節ではこの二つの方法の関連を調べよう．

回転の生成演算子としての軌道角運動量

はじめに，(3.6.1) で定義される軌道角運動量が，角運動量の交換関係

$$\left[L_i\,,\ L_j\right]=i\varepsilon_{ijk}\hbar L_k \qquad (3.6.2)$$

を，$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{p}$ の成分の間の交換関係によって満足していることに注目しよう．このことは次のようにして容易に証明できる：

$$\begin{aligned}
\left[L_x , L_y \right] &= \left[yp_z - zp_y \ , \ zp_x - xp_z \right] \\
&= \left[yp_z \ , \ zp_x \right] + \left[zp_y \ , \ xp_z \right] = yp_x\left[p_z \ , \ z \right] + p_y x\left[z, \ p_z \right] \\
&= i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z \\
&\quad \vdots
\end{aligned} \tag{3.6.3}$$

次に

$$1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z = 1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)(xp_y - yp_x) \tag{3.6.4}$$

を任意の位置固有ケット $|x', y', z'>$ に作用させ，これが z-軸のまわりの角度 $\delta\phi$ だけの無限小回転演算子として解釈できるかを調べる．運動量が平行移動の生成演算子である事実を用いると[（1.6.32）を参照]

$$\begin{aligned}
&\left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right]|x', y', z'> \\
&= \left[1 - i\left(\frac{p_y}{\hbar}\right)(\delta\phi\, x') + i\left(\frac{p_x}{\hbar}\right)(\delta\phi\, y')\right]|x', y', z'> \\
&= |x' - y'\delta\phi, \ y' + x'\delta\phi, \ z'>
\end{aligned} \tag{3.6.5}$$

が得られる．この式は正に，L_z が z-軸のまわりの無限小回転を生成する場合に期待される式である．このようにして，$\boldsymbol{p}$ が平行移動を生成するのなら $\boldsymbol{L}$ は回転を生成することを示すことができた．

スピンを持たない1粒子の，任意の物理状態の波動関数が，$<x', y', z'|\alpha>$ で与えられたとしよう．z-軸のまわりに無限小回転をさせると，回転後の状態の波動関数は

$$<x', y', z'|\left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right]|\alpha> = <x' + y'\delta\phi, y' - x'\delta\phi, z'|\alpha> \tag{3.6.6}$$

である．実際に基底の座標を変えて

$$<x', y', z'|\alpha> \rightarrow <r, \theta, \phi|\alpha> \tag{3.6.7}$$

とするともっとはっきりする．回転後の状態に対しては，(3.6.6) により

$$<r, \theta, \phi|\left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right]|\alpha> = <r, \theta, \phi - \delta\phi|\alpha>$$
$$= <r, \theta, \phi|\alpha> - \delta\phi\frac{\partial}{\partial\phi}<r, \theta, \phi|\alpha> \tag{3.6.8}$$

が得られる．$<r, \theta, \phi|$ は任意の位置固有ブラであるので，この式より

$$<x'|L_z|\alpha> = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}<x'|\alpha> \tag{3.6.9}$$

のように L_z を微分演算子と同一視することができる．これは波動力学でよく知られた結果である．この関係は，運動量の位置表示を用いても簡単に得られるが，ここで述べた導出は，L_z の回転生成演算子としての役割を強調したものである．

次に x-軸のまわりの角度 $\delta\phi_x$ の回転を考えよう．(3.6.6) との対比で

$$<x', y', z'|\left[1 - i\left(\frac{\delta\phi_x}{\hbar}\right)L_x\right]|\alpha>$$
$$= <x', y' + z'\delta\phi_x, z' - y'\delta\phi_x|\alpha> \tag{3.6.10}$$

となる．x', y', z' を球座標で表わすと

$$<x'|L_x|\alpha> = -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)<x'|\alpha> \tag{3.6.11}$$

を示すことができる．同じように

$$<x'|L_y|\alpha> = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)<x'|\alpha> \tag{3.6.12}$$

である．(3.6.11) と (3.6.12) を用いると，(3.5.5) で定義されたはしご演算子 $L_{\pm}$ については

$$\langle \boldsymbol{x}'|L_{\pm}|\alpha\rangle = -i\hbar e^{\pm i\phi}\left(\pm i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle \tag{3.6.13}$$

となる．最後に $\langle \boldsymbol{x}'|\boldsymbol{L}^2|\alpha\rangle$ を

$$\boldsymbol{L}^2 = L_z^2 + \frac{1}{2}(L_+L_- + L_-L_+) \tag{3.6.14}$$

と (3.6.9)，(3.6.13) を用いて

$$\langle \boldsymbol{x}'|\boldsymbol{L}^2|\alpha\rangle = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle \tag{3.6.15}$$

のように書くことが可能である．$1/r^2$の因子を別にすれば，この式の微分演算子はちょうど，球座標で書いたラプラシアンの角度部分であることが分かるであろう．

$\boldsymbol{L}^2$ 演算子とラプラシアンの角度部分との間のこの関係を，直接，運動エネルギーの演算子を観察するという別の方法で確かめるのは教訓的である．まず一つの重要な演算子の恒等式，

$$\boldsymbol{L}^2 = \boldsymbol{x}^2\boldsymbol{p}^2 - (\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})^2 + i\hbar\,\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p} \tag{3.6.16}$$

を書いておこう．ここで $\boldsymbol{x}^2$ とあるのは，ちょうど $\boldsymbol{p}^2$ が演算子 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}$ を表わすのと同様に，演算子 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}$ であると理解する．この証明は直接計算してできる：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}^2 &= \sum_{ijlmk}\varepsilon_{ijk}x_ip_j\,\varepsilon_{lmk}x_lp_m\\ &= \sum_{ijlm}(\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl})x_ip_jx_lp_m\end{aligned}$$

$$= \sum_{ijlm} [\, \delta_{il}\delta_{jm}\, x_i\, (\, x_l p_j - i\hbar\, \delta_{jl})p_m - \delta_{im}\delta_{jl}\, x_i p_j\, (\, p_m x_l + i\hbar\, \delta_{lm})\,]$$

$$= \boldsymbol{x}^2\boldsymbol{p}^2 - i\hbar\, \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p} - \sum_{ijlm} \delta_{im}\delta_{jl} [x_i p_m (x_l p_j - i\hbar\, \delta_{jl}) + i\hbar\, \delta_{lm} x_j p_j\,]$$

$$= \boldsymbol{x}^2\boldsymbol{p}^2 - (\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})^2 + i\hbar\, \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}\ . \tag{3.6.17}$$

上の表式を $\langle \boldsymbol{x}'|$ と $|\alpha\rangle$ ではさむ前に，まず

$$\langle \boldsymbol{x}'|\,\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}\,|\alpha\rangle = \boldsymbol{x}'\cdot(-i\hbar\, \nabla'\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle)$$

$$= -i\hbar\, r\frac{\partial}{\partial r}\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle \tag{3.6.18}$$

であることに注意する．同様に

$$\langle \boldsymbol{x}'|(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})^2|\alpha\rangle = -\hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle\right)$$

$$= -\hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle + r\frac{\partial}{\partial r}\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle\right) \tag{3.6.19}$$

であるので

$$\langle \boldsymbol{x}'|\boldsymbol{L}^2|\alpha\rangle = r^2\langle \boldsymbol{x}'|\boldsymbol{p}^2|\alpha\rangle$$

$$+\ \hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle + 2r\frac{\partial}{\partial r}\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle\right) \tag{3.6.20}$$

となる．運動エネルギー $\boldsymbol{p}^2/2m$ に関しては

$$\frac{1}{2m}\langle \boldsymbol{x}'|\boldsymbol{p}^2|\alpha\rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla'^2\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle$$

$$= -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\langle \boldsymbol{x}'|\boldsymbol{L}^2|\alpha\rangle\right) \tag{3.6.21}$$

が得られる．この最後の行のはじめの 2 項は，$\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle$ にかかるラプラシアンの動径部分である．したがって最後の項は $\langle \boldsymbol{x}'|\alpha\rangle$ にかかるラプラシアンの角度部分に外ならない．これは (3.6.15) と全く一致した結論である．

球面調和関数

球対称のポテンシャルのもとでスピンを持たない1個の粒子を考えよう．この波動方程式は球座標で分離可能なことが知られており，エネルギー固有関数は

$$\langle \boldsymbol{x}' | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \qquad (3.6.22)$$

のように書ける．ここで位置ベクトル $\boldsymbol{x}'$ は球座標，r，θ，ϕ により表わされ，n は l や m とは異なるある量子数，例えば束縛状態の問題の動径量子数，あるいは自由粒子の球面波のエネルギーをあらわす．3.10節でさらに明らかになることであるが，この形は問題が回転不変であることの直接的帰結とみなすことができる．ハミルトニアンが球対称であると，H は L_z や $\boldsymbol{L}^2$ と交換し，エネルギー固有ケットもまた $\boldsymbol{L}^2$ や L_z の固有ケットであると期待される．L_k ($k=1,2.3$) は角運動量の交換関係を満足するので，$\boldsymbol{L}^2$ と L_z の固有値は $l(l+1)\hbar^2$ および $m\hbar=[-l\hbar,\ (-l+1)\hbar,\ \cdots,\ (l-1)\hbar,\ l\hbar]$ であると期待される．

角度依存性は球対称のすべての問題に共通であるから，これを分離し

$$\langle \hat{\boldsymbol{n}} | l, m \rangle = Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\hat{\boldsymbol{n}}) \qquad (3.6.23)$$

を考える．ここで**方向固有ケット** $|\hat{\boldsymbol{n}}\rangle$ を定義した．この観点からすると，$Y_l^m(\theta, \phi)$ は l, m で特徴づけられる状態において，θ と ϕ で特徴づけられる方向に見出される振幅である．

軌道角運動量の固有ケットを含む関係式があるとしよう．するとただちに球面調和関数を含む，対応する関係式を書くことができる．例えば，固有値方程式

$$L_z | l, m \rangle = m\hbar\, | l, m \rangle \qquad (3.6.24)$$

を例にしよう．左から $\langle \hat{\boldsymbol{n}} |$ をかけ (3.6.9) を用いると

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}<\hat{\boldsymbol{n}}|l, m> = m\hbar<\hat{\boldsymbol{n}}|l, m> \tag{3.6.25}$$

が得られる．この等式は

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar\, Y_l^m(\theta, \phi) \tag{3.6.26}$$

と同じである．これは $Y_l^m(\theta, \phi)$ の ϕ-依存性が，$e^{im\phi}$ のようであることを意味している．同様に

$$\boldsymbol{L}^2|l,\ m> = l(l+1)\hbar^2|l, m> \tag{3.6.27}$$

に対応して［（3.6.15）を見よ］

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+l(l+1)\right]Y_l^m = 0 \tag{3.6.28}$$

となる．これはまさに Y_l^m 自身が満たす偏微分方程式である．直交関係

$$<l', m'|l, m> = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{3.6.29}$$

から

$$\int_0^{2\pi}d\phi\int_{-1}^{1}d(\cos\theta)\ Y_{l'}^{m'*}(\theta, \phi)\ Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{3.6.30}$$

が導かれるが，この際に方向固有ケットに対する完備関係式

$$\int d\Omega_{\hat{n}}|\hat{\boldsymbol{n}}><\hat{\boldsymbol{n}}| = 1 \tag{3.6.31}$$

を用いている．

Y_l^m 自身を求めるには，$m=l$ の場合から始めるのがよい．

$$L_+|l, l> = 0 \tag{3.6.32}$$

であるから，（3.6.13）を使うと，これより

$$-i\hbar e^{i\phi}\left[i\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\langle\hat{\boldsymbol{n}}|l,l\rangle=0 \qquad (3.6.33)$$

が導ける．ここで ϕ-依存性は $e^{il\phi}$ のようでなければならないことを思い出すと，この偏微分方程式は

$$\langle\hat{\boldsymbol{n}}|l,l\rangle = Y_l^l(\theta,\phi)=c_l e^{il\phi}\sin^l\theta \qquad (3.6.34)$$

によって満足されることが，容易に示せる．ここで c_l は（3.6.30）から決定される規格化定数であり

$$c_l=\left[\frac{(-1)^l}{2^l l\,!}\right]\sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}} \qquad (3.6.35)$$

となる*.

（3.6.34）より出発して

$$\langle\hat{\boldsymbol{n}}|l,m-1\rangle=\frac{\langle\hat{\boldsymbol{n}}|L_-|l,m\rangle}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,\hbar}$$
$$=\frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}}e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle\hat{\boldsymbol{n}}|l,m\rangle \qquad (3.6.36)$$

を次々に用いると，l を決めたときのすべての Y_l^m が得られる．これは初等量子力学の教科書の多くに載っていることなので，ここで詳細な計算はしない．結果は $m\geq 0$ のとき

$$Y_l^m(\theta,\phi)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}}\;e^{im\phi}\frac{1}{\sin^m\theta}\frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}}(\sin\theta)^{2l} \qquad (3.6.37)$$

---

* 規格化条件（3.6.30）からは，もちろん c_l の位相は決まらない．（3.6.35）に因子 $(-1)^l$ が挿入されているのは，演算子 L_- をつぎつぎにかけて $m=0$ の状態に達したとき，ルジャンドル多項式 $P_l(\cos\theta)$ と同じ符号の Y_l^0 が得られるようにするためである．$P_l(\cos\theta)$ の位相は，$P_l(1)=1$ により決められる［(3.6.39) を見よ］.

である．また Y_l^{-m} を

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m [\, Y_l^m(\theta, \phi)]^* \tag{3.6.38}$$

で定義する．m の正負に拘らず $Y_l^m(\theta, \phi)$ の θ に依存する部分は，$[\sin\theta]^{|m|}$に $\cos\theta$ の $l-|m|$次多項式をかけたものである．$m=0$ に対しては

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, P_l(\cos\theta) \tag{3.6.39}$$

が得られる．

角運動量の交換関係だけから見ると，なぜ l が半整数をとることができないのかはっきりしないであろう．しかし，実際に半整数の値をとってはならないとする議論が幾つか提出できる．第一に半整数の l，従って半整数の m に対しては，2π の回転の後，波動関数にマイナスの符号がつく：

$$e^{im(2\pi)} = -1. \tag{3.6.40}$$

その結果，波動関数は一価でなくなる．一方2.4節で，状態ケットの位置固有ケットによる展開が一意的であるという要請から，波動関数が一価でなければならないことを指摘した．2π の回転の後波動関数に必らずプラスの符号がつくことは，$\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$ で定義された $\boldsymbol{L}$ が回転の生成演算子に外ならないとすると，証明できる．これは 2π の回転を受けた状態の波動関数が，もとの波動関数そのもので符号の変化がないという事実

$$\begin{aligned}
&< \boldsymbol{x}'|\exp\left(\frac{-i\,L_z\,2\pi}{\hbar}\right)|\alpha> \\
&= < x'\cos2\pi + y'\sin2\pi,\ \ y'\cos2\pi - x'\sin2\pi,\ \ z'|\alpha> \\
&= < \boldsymbol{x}'|\alpha>
\end{aligned} \tag{3.6.41}$$

から示せる．ここで（3.6.6）を有限角度に拡張した形を用いた．

次に半整数の l を持つ $Y_l^m(\theta, \phi)$ が可能であるとしよう．具体例とし

て最も簡単な $l=m=1/2$ の場合を選ぶ．すると（3.6.34）に従って

$$Y_{1/2}^{1/2}(\theta, \phi) = c_{1/2} e^{i\phi/2} \sqrt{\sin\theta} \tag{3.6.42}$$

となるであろう．L_- の性質[(3.6.36) を見よ]から，このとき

$$\begin{aligned} Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi) &= e^{-i\phi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)(c_{1/2} e^{i\phi/2}\sqrt{\sin\theta}) \\ &= -c_{1/2} e^{-i\phi/2}\cot\theta\sqrt{\sin\theta} \end{aligned} \tag{3.6.43}$$

が得られる．この表式は $\theta=0, \pi$ で発散するので許されない．もっと悪いことに，微分方程式

$$\begin{aligned} \langle\hat{\boldsymbol{n}}|L_-|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= -i\hbar e^{-i\phi}\left(-i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle\hat{\boldsymbol{n}}|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \tag{3.6.44}$$

から直接得られる

$$Y_{1/2}^{-1/2} = c'_{1/2} e^{-i\phi/2}\sqrt{\sin\theta} \tag{3.6.45}$$

は，（3.6.43）と明らかに矛盾している．

さらに，微分方程式に関するシュトルム・リューヴィユの理論を用いれば，（3.6.28）の解は l が整数のとき完全系を作ることが知られている．θ と ϕ の任意の関数は，整数 l および m のみを用いて展開できる．以上のすべての理由により，半整数の l の値を持つ軌道角運動量を考えてみても，無益である．

回転行列としての球面調和関数

軌道角運動量に関するこの節の終りに，前節で導入した回転行列の観点から球面波動関数を議論しよう．この2つの表現の間の関連は，z-軸の正方向を向いた方向固有ケット $|\hat{\boldsymbol{z}}\rangle$ に適当な回転演算子をかけ，最も一般的な方向固有ケット $|\hat{\boldsymbol{n}}\rangle$ を作り上げることにより容易に求められる．見出したい

のは

$$|\hat{\boldsymbol{n}}\rangle = \mathscr{D}(R)|\hat{\boldsymbol{z}}\rangle \tag{3.6.46}$$

を満たす $\mathscr{D}(R)$ である．それには3.2節で $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$ の固有スピノルを作るのに用いた技法に，頼ることができる．まず y-軸のまわりで角度 θ だけ回転させ，次に z-軸のまわりで角度 ϕ の回転をさせる．図3.3で $\beta\to\theta$，$\alpha\to\phi$ としたものを参照しよう．オイラー角の記法では

$$\mathscr{D}(R) = \mathscr{D}(\alpha=\phi,\ \beta=\theta,\ \gamma=0) \tag{3.6.47}$$

となる．(3.6.46) を

$$|\hat{\boldsymbol{n}}\rangle = \sum_l \sum_m \mathscr{D}(R)|l,m\rangle\langle l,m|\hat{\boldsymbol{z}}\rangle \tag{3.6.48}$$

と書くと，$|\hat{\boldsymbol{n}}\rangle$ は $|l,m\rangle$ により展開されたときすべての可能な l の値を含むことが分かる．しかしこの方程式に左から $\langle l,m'|$ をかけると，l の和の中でただ一つの項の寄与が残り

$$\begin{aligned}&\langle l,m'|\hat{\boldsymbol{n}}\rangle\\ &= \sum_m \mathscr{D}^{(l)}_{m'm}(\alpha=\phi,\beta=\theta,\gamma=0)\langle l,m|\hat{\boldsymbol{z}}\rangle\end{aligned} \tag{3.6.49}$$

となる．ここで $\langle l,m|\hat{\boldsymbol{z}}\rangle$ は単に数値であり，事実，$\theta=0$，ϕ を不定として計算した $Y_l^{m*}(\theta,\ \phi)$ に正確に等しい．一方 $\theta=0$ で Y_l^m は $m\neq0$ に対してゼロになることが知られている．これは $|\hat{\boldsymbol{z}}\rangle$ が L_z（xp_y-yp_x に等しい）の固有値ゼロの固有ケットであることからも，直接に分かる．したがって

$$\begin{aligned}\langle l,m|\hat{\boldsymbol{z}}\rangle &= Y_l^{m*}(\theta=0,\ \phi=\text{不定})\,\delta_{m0}\\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)\Big|_{\cos\theta=1}\delta_{m0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m0}\end{aligned} \tag{3.6.50}$$

と書くことができる．(3.6.49) に戻ると

$$Y_l^{m'*}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\mathscr{D}^{(l)}_{m'0}(\alpha=\phi,\beta=\theta,\gamma=0)\,, \tag{3.6.51}$$

すなわち

$$\mathscr{D}^{(l)}_{m0}(\alpha, \beta, \gamma=0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, Y_l^{m*}(\theta, \phi)\Big|_{\theta=\beta,\ \phi=\alpha} \qquad (3.6.52)$$

となる．特に重要である $m=0$ の場合には，(3.5.50)，(3.5.51) より

$$d^{(l)}_{00}(\beta)\Big|_{\beta=\theta} = P_l(\cos\theta) \qquad (3.6.53)$$

となることに注目しよう．

3.7 角運動量の合成

角運動量の合成は，原子分光から核や素粒子の衝突に至るまで，現代物理学のあらゆる領域で適用され大変重要な役割を果す．その上，角運動量の合成を学習することは，第1章で広く議論した基底の変更という概念を説明する，絶好の機会になる．

角運動量の合成の簡単な例

角運動量の合成についての形式的理論を学ぶ前に，読者になじみがあると思われる二つの簡単な例に目を向けるとよいであろう．それは，(1)軌道角運動量とスピン角運動量とをいかに合成するか，(2)スピン1/2の2粒子のスピン角運動量をいかに合成するか，の問題である．

以前調べたのは，スピン1/2の系で位置や運動量といったスピン以外の量子力学的自由度を無視した場合，および量子力学的粒子で空間的自由度（位置や運動量など）は考慮するが内部自由度（スピンのような量）を無視した場合，の二つであった．スピンを持つ粒子の実際を記述するには，もちろん，空間的自由度と内部自由度を共に考慮しなければならない．1個のスピン1/2粒子の基底ケットは，位置固有ケット $\{|\mathbf{x}'\rangle\}$ で張られる無限次元のケット空間と，$|+\rangle$ と $|-\rangle$ で張られる2次元スピン空間との直積空間内で表わされるであろう．具体的に書くと基底ケットは

$$|\boldsymbol{x}', \pm\rangle = |\boldsymbol{x}'\rangle \otimes |\pm\rangle \tag{3.7.1}$$

となる．ここで$\{|\boldsymbol{x}'\rangle\}$で張られる空間内の任意の演算子は，$|\pm\rangle$で張られる2次元空間内の任意の演算子と交換する．

回転演算子はこの場合も $\exp(-i\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi/\hbar)$ の形をしているが，回転の生成演算子 $\boldsymbol{J}$ は二つの部分からなる．すなわち

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S} \tag{3.7.2}$$

である．(3.7.2)を

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} \otimes 1 + 1 \otimes \boldsymbol{S} \tag{3.7.3}$$

と書いた方が，実際もっと明確であろう．この式で $\boldsymbol{L}\otimes 1$ の1はスピン空間の恒等演算子を表わし，$1\otimes\boldsymbol{S}$ の1は位置固有ケットで張られる無限次元ケット空間内の恒等演算子を表わす．$\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{S}$ とは交換するので

$$\begin{aligned}\mathscr{D}(R) &= \mathscr{D}^{(\text{軌道})}(R)\otimes\mathscr{D}^{(\text{スピン})}(R)\\ &= \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{L}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi}{\hbar}\right)\otimes\exp\left(-\frac{i\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\phi}{\hbar}\right)\end{aligned} \tag{3.7.4}$$

と書くことができる．スピンを持つ1粒子の波動関数は

$$\langle\boldsymbol{x}', \pm|\alpha\rangle = \psi_\pm(\boldsymbol{x}') \tag{3.7.5}$$

と表わされる．2成分 $\psi_\pm$ はよく次のように列の形に並べられる：

$$\begin{pmatrix}\psi_+(\boldsymbol{x}')\\ \psi_-(\boldsymbol{x}')\end{pmatrix} \tag{3.7.6}$$

ここで $|\psi_\pm(\boldsymbol{x}')|^2$ は粒子を場所 $\boldsymbol{x}'$ でそれぞれスピン上向き，下向きの状態に見出す確率をあらわす．空間部分の基底ケットとして $|\boldsymbol{x}'\rangle$ の代わりに，$\boldsymbol{L}^2$ と L_z の固有ケットでそれぞれの固有値が $\hbar^2 l(l+1)$ と $m_l\hbar$ である，$|n, l,$

$m\rangle$ を用いてもよい．スピン部分に関しては $|\pm\rangle$ は $\boldsymbol{S}^2$ と S_z の固有ケットであり，固有値はそれぞれ $3\hbar^2/4$ と $\pm\hbar/2$ である．しかし後に分かるように，基底ケットとして $\boldsymbol{J}^2$，J_z，$\boldsymbol{L}^2$ および $\boldsymbol{S}^2$ の固有ケットを用いてもよい．言葉をかえるとスピンを持つ1粒子の状態ケットを，$\boldsymbol{L}^2$，$\boldsymbol{S}^2$，L_z および S_z の同時固有ケットによって展開することもできるし，あるいは $\boldsymbol{J}^2$，J_z，$\boldsymbol{L}^2$ および $\boldsymbol{S}^2$ の同時固有ケットによって展開することもできる．二つの記述がどう関係しているか，後で詳しく調べよう．

2番目の例として，2個のスピン1/2の粒子—例えば2個の電子—を軌道の自由度を除いて調べる．全体のスピン演算子はふつう

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2 \tag{3.7.7}$$

と書かれるが，これもやはり

$$\boldsymbol{S}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \boldsymbol{S}_2 \tag{3.7.8}$$

のように理解する必要がある．ここで第1項(第2項)の1は電子2(1)のスピン空間における恒等演算子を表わす．当然

$$[S_{1x}, S_{2y}] = 0 \tag{3.7.9}$$

などが成り立つ．電子1(2)の空間内では通常の交換関係

$$[S_{1x}, S_{1y}] = i\hbar S_{1z},\ [S_{2x}, S_{2y}] = i\hbar S_{2z},\ \cdots\cdots \tag{3.7.10}$$

が成り立つ．(3.7.9)と(3.7.10)の直接の結果として

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \tag{3.7.11}$$

などが全体のスピン演算子に対して成り立つ．

様々なスピン演算子の固有値は，次のように記される：

$$\boldsymbol{S}^2 = (\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2 : s(s+1)\hbar^2$$

$$\begin{aligned} &S_z = S_{1z} + S_{2z} &&: m\hbar \\ &S_{1z} &&: m_1\hbar \\ &S_{2z} &&: m_2\hbar \end{aligned} \tag{3.7.12}$$

この場合にも，2電子の任意のスピン状態に対応するケットを展開するのに，$\boldsymbol{S}^2$ と S_z の固有ケットを用いることもできるしあるいは S_{1z} と S_{2z} の固有ケットを用いることもできる．この二つの可能性は次のようである：

1．S_{1z} と S_{2z} の固有ケットに基づく $\{m_1, m_2\}$ 表示：

$$|+\ +>,\ |+\ ->,\ |-\ +>,\ \text{および}\ |-\ -> \tag{3.7.13}$$

ここで例えば $|+\ ->$ は $m_1 = \dfrac{1}{2}$，$m_2 = -\dfrac{1}{2}$ をあらわす．

2．$\boldsymbol{S}^2$ と S_z の固有値に基づく，$\{s, m\}$ 表示（ないし3重項-1重項表示）：

$$|s=1,\ m=\pm 1, 0>,\ |s=0,\ m=0> \tag{3.7.14}$$

ここで $s=1$ ($s=0$) はスピン3重項(スピン1重項)をあらわす．それぞれの組には基底ケットが4個あることに注目しよう．この二組の基底ケットの間の関係は次のようである：

$$|s=1,\ m=1> = |+\ +>, \tag{3.7.15a}$$

$$|s=1,\ m=0> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\ -> + |-\ +>), \tag{3.7.15b}$$

$$|s=1,\ m=-1> = |-\ ->, \tag{3.7.15c}$$

$$|s=0,\ m=0> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\ -> - |-\ +>). \tag{3.7.15d}$$

(3.7.15a)の右辺は，2個の電子が共に上向きスピンを持つことを意味し

ている．この状態に対応するのは，$s=1$，$m=1$だけである．(3.7.15b)は，(3.7.15a)からはしご演算子

$$S_- \equiv S_{1-} + S_{2-} = (S_{1x} - iS_{1y}) + (S_{2x} - iS_{2y}) \quad (3.7.16)$$

を(3.7.15a)の両辺にかけて求める．この操作をするとき，例えばS_{1-}のような電子1の演算子は，$|+\ +>$の中のはじめの成分にのみ働くことを，忘れてはならない．すなわち

$$S_-|s=1,\ m=1> = (S_{1-} + S_{2-})|+\ +> \quad (3.7.17)$$

は

$$\sqrt{(1+1)(1-1+1)}\,|s=1,\ m=0> = \sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)}\,|-\ +> + \sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)}\,|+\ -> \quad (3.7.18)$$

と書けるので，ただちに(3.7.15b)が導ける．同様に(3.7.16)をもう一度(3.7.15b)にかけて，$|s=1,m=-1>$を求めることができる．最後に(3.7.15d)は，他の三つのケット，特に(3.7.15b)と直交することを要請して得られる．

(3.7.15)の右辺に現われる係数は，後に詳しく議論する**クレプシュ・ゴルダン係数**のもっとも簡単な例である．これらは正に，$\{m_1,\ m_2\}$基底を$\{s,\ m\}$基底と関連させる変換行列の要素である．これらの係数を違う方法で導くのは教育的である．いま演算子

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} \quad (3.7.19)$$

に対応する 4 × 4 行列を，(m_1, m_2)の基底を用いて書いたとしよう．この正方行列は，S_{1+} のような演算子が，$|-\ +>$ と $|++>$ をつなぐから，明らかに対角的でない．この行列を対角化するユニタリー行列は，$|m_1, m_2>$ 基底ケットを $|s, m>$ 基底ケットに変える．このユニタリー行列の要素は正にこの問題のクレプシュ・ゴルダン係数である．これを詳しく調べることを読者に勧めたい．

角運動量合成の形式論

簡単な例を考察して物理的内容がいくらか分かったと思うので，角運動量合成の形式論をここでもっと系統的に学んでおこう．異なる部分空間にある，二つの角運動量演算子 $\boldsymbol{J}_1$ および $\boldsymbol{J}_2$ を考える．$\boldsymbol{J}_1$ ($\boldsymbol{J}_2$) の各成分は普通の角運動量の変換関係，

$$\left[J_{1i},\ J_{1j}\right] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} J_{1k} \tag{3.7.20a}$$

および

$$\left[J_{2i},\ J_{2j}\right] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} J_{2k} \tag{3.7.20b}$$

を満たす．一方，異なる部分空間から選んだ一組の演算子の間では

$$\left[J_{1k},\ J_{2l}\right] = 0 \tag{3.7.21}$$

が成り立つ．

部分空間 1 と部分空間 2 の両方に作用する無限小回転演算子は

$$\begin{aligned}&\left(1 - \frac{i\,\boldsymbol{J}_1\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\delta\phi}{\hbar}\right)\otimes\left(1 - \frac{i\,\boldsymbol{J}_2\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\delta\phi}{\hbar}\right)\\ &\qquad = 1 - \frac{i\,(\boldsymbol{J}_1\otimes 1 + 1\otimes\boldsymbol{J}_2)\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\delta\phi}{\hbar}\end{aligned} \tag{3.7.22}$$

のように表わされる．全角運動量は

$$\boldsymbol{J} \equiv \boldsymbol{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \boldsymbol{J}_2 \qquad (3.7.23)$$

で定義する．これは

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2 \qquad (3.7.24)$$

と書くのが普通である．(3.7.22)を角度が有限の場合に表わすと

$$\mathscr{D}_1(R) \otimes \mathscr{D}_2(R) = \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{J}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\phi}{\hbar}\right) \otimes \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{J}_2 \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\phi}{\hbar}\right) \qquad (3.7.25)$$

となる．ここに現われる二つの部分空間での回転軸と回転角は同じであることに注意しよう．

全角運動量 $\boldsymbol{J}$ が(3.7.20)と(3.7.21)の直接の結果として，角運動量の交換関係

$$\left[J_i,\ J_j \right] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk} J_k \qquad (3.7.26)$$

を満たしていることを記すのは大変重要である．いい換えれば $\boldsymbol{J}$ は3.1節の意味で角運動量である．$\boldsymbol{J}$ が全体の系に関する回転生成子であることから，物理的にこれはもっともといえる．3.5節で学んだすべてのこと――例えば，$\boldsymbol{J}^2$ および J_z の固有値スペクトルやはしご演算子の行列要素――は全角運動量 $\boldsymbol{J}$ に対しても成立する．

基底ケットの選び方として二通りの任意性がある．

選択**A**：$\boldsymbol{J}_1^2$，$\boldsymbol{J}_2^2$，J_{1z} および J_{2z} の同時固有ケットで，$|j_1\ j_2\ ;\ m_1\ m_2\rangle$ と記されるもの．明らかにこれら4個の演算子は，互いに交換する．定義により，ケットの満足する方程式は

$$\boldsymbol{J}_1^2 |j_1 j_2\ ; m_1\ m_2\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2 |j_1\ j_2\ ; m_1\ m_2\rangle \qquad (3.7.27a)$$

$$J_{1z} |j_1 j_2\ ; m_1\ m_2\rangle = m_1\hbar\, |j_1\ j_2\ ; m_1\ m_2\rangle \qquad (3.7.27b)$$

$$\boldsymbol{J}_2^2|j_1j_2\ ;m_1\ \ m_2> = j_2(j_2+1)\hbar^2|j_1\ \ j_2\ ;m_1\ \ m_2> \qquad (3.7.27c)$$

$$J_{2z}|j_1j_2\ ;m_1\ \ m_2> = m_2\hbar\,|j_1\ \ j_2\ ;m_1\ \ m_2> \qquad (3.7.27d)$$

である．

選択B：　$\boldsymbol{J}^2$，$\boldsymbol{J}_1^2$，$\boldsymbol{J}_2^2$ および J_z の同時固有ケット．この組の演算子は互いに交換することにまず注目する．特に

$$\left[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}_1^2\right]=0 \qquad (3.7.28)$$

が成り立つことは，$\boldsymbol{J}^2$ を

$$\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{J}_1^2 + \boldsymbol{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} \qquad (3.7.29)$$

と書くと容易に分かる．選択Bの基底ケットを記すのには $|j_1\ \ j_2\ ;jm>$ を用いる：

$$\boldsymbol{J}_1^2|j_1j_2\ ;jm> = j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1\ \ j_2\ ;jm> \qquad (3.7.30a)$$

$$\boldsymbol{J}_2^2|j_1j_2\ ;jm> = j_2(j_2+1)\hbar^2|j_1\ \ j_2\ ;jm> \qquad (3.7.30b)$$

$$\boldsymbol{J}^2|j_1j_2\ ;jm> = j(j+1)\hbar^2|j_1\ \ j_2\ ;jm> \qquad (3.7.30c)$$

$$J_z|j_1j_2\ ;jm> = m\hbar\,|j_1\ \ j_2\ ;jm>. \qquad (3.7.30d)$$

ここで j_1, j_2 は自明な場合が多いので，そのときは基底ケットを単に $|j, m>$ と記す．

(3.7.29)を用いて容易に確かめられるように，たとえ

$$\left[\boldsymbol{J}^2, J_z\right] = 0 \qquad (3.7.31)$$

であっても

$$\left[\boldsymbol{J}^2, J_{1z} \right] \neq 0, \quad \left[\boldsymbol{J}^2, \ J_{2z} \right] \neq 0 \qquad (3.7.32)$$

であることに注意するのは大変重要である．これは選択Aの演算子の組に $\boldsymbol{J}^2$ をつけ加えるわけにはいかないことを意味している．同じように選択Bの演算子の組に，J_{1z} および（または）J_{2z} をつけ加えるわけにはいかない．互いに両立できるように構成した演算子の最大の組が2組であるのに対応して，基底ケットの可能な組も2組である．

この2組の基底を結びつける，1.5節の意味のユニタリー変換を考察しよう：

$$|j_1 \ j_2 ; jm\rangle = \sum_{m_1}\sum_{m_2} |j_1 \ \ j_2 ; m_1 \ \ m_2\rangle \langle j_1 j_2 ; m_1 m_2 | j_1 j_2 ; jm\rangle. \qquad (3.7.33)$$

ここで

$$\sum_{m_1}\sum_{m_2} |j_1 \ \ j_2 ; m_1 \ \ m_2\rangle\langle j_1 \ \ j_2 ; m_1 \ \ m_2| = 1 \qquad (3.7.34)$$

を用いた．この式の右辺は，j_1 と j_2 が与えられたケット空間での恒等演算子である．この変換行列の要素である $\langle j_1 \ j_2 ; m_1 \ m_2 | j_1 \ j_2 ; jm\rangle$ は**クレプシュ・ゴルダン係数**である．

クレプシュ・ゴルダン係数には，今から学んでいく多くの重要な性質がある．第1に，この係数は

$$m = m_1 + m_2 \qquad (3.7.35)$$

でないとゼロになる．これを証明するのに，まず

$$(J_z - J_{1z} - J_{2z})|j_1 j_2 ; jm\rangle = 0 \qquad (3.7.36)$$

に注目しよう．左から $\langle j_1 j_2 ; m_1 \ \ m_2|$ をかけると

$$(m - m_1 - m_2)\langle j_1 j_2 ; m_1 m_2 | j_1 j_2 ; jm\rangle = 0 \qquad (3.7.37)$$

となり，上の命題が証明される．ディラックの記法の偉力に感心させられるであろう！　ここで用いたようにクレプシュ・ゴルダン係数をディラックのブラケット形式で書くと実に便利である．

第2に，この係数は

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \tag{3.7.38}$$

でなければゼロになる．この性質は，$\boldsymbol{J}$ を $\boldsymbol{J}_1$ と $\boldsymbol{J}_2$ のベクトル和と見なす，角運動量合成のベクトルモデルの観点からすると，自明に見えるかもしれない．しかしこのことを，(3.7.38)が成り立つとき，$\left\{ |j_1\ j_2 ; m_1\ m_2> \right\}$ で張られる空間の次元が，$\left\{ |j_1 j_2 ; jm> \right\}$ で張られる空間の次元と同じであることを示して確かめるのも価値がある．(m_1, m_2) の数え方では，与えられた j_1 に対して $2j_1 + 1$ 個の可能な m_1 の値があり，もう一方の角運動量 j_2 についても同様な議論ができるので

$$N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \tag{3.7.39}$$

だけある．(j, m) の数え方では各々の j に対して $2j+1$ 個の状態があるが，ここで(3.7.38)によれば j 自身が $j_1 - j_2$ から $j_1 + j_2$ までの値をとることに注目しよう．いま $j_1 \geq j_2$ としても一般性を失わない．したがって

$$\begin{aligned} N &= \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) \\ &= \frac{1}{2}\left[\left\{ 2(j_1 - j_2) + 1 \right\} + \left\{ 2(j_1 + j_2) + 1 \right\} \right](2j_2 + 1) \\ &= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \end{aligned} \tag{3.7.40}$$

が得られる．二つの方法とも同じ N の値を与えるので，(3.7.38)に矛盾のないことが分かる*．

---

* (3.7.38)式の完全な証明は，Gottfried 1966, p. 215および本書の附録Bに与えられている．

クレプシュ・ゴルダン係数はユニタリー行列を形成する．その行列要素は慣習上実数にとる．この直接の結果として，ブラ・ケットを逆にした係数 $\langle j_1 j_2 ; jm | j_1 j_2 ; m_1 m_2 \rangle$ は $\langle j_1 j_2 ; m_1 m_2 | j_1 j_2 ; jm \rangle$ と同じである．実数のユニタリー行列は直交行列であるから，直交条件

$$\sum_j \sum_m \langle j_1 \; j_2 ; m_1 m_2 | j_1 j_2 ; jm \rangle \langle j_1 j_2 ; m_1' m_2' | j_1 j_2 ; jm \rangle$$

$$= \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'} \tag{3.7.41}$$

が成り立つ．これは $\left\{ | j_1 j_2 ; m_1 \; m_2 \rangle \right\}$ の規格直交性と，クレプシュ・ゴルダン係数が実数であることから明らかである．同様にして

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1 j_2 ; m_1 m_2 | j_1 j_2 ; jm \rangle \langle j_1 j_2 ; m_1 m_2 | j_1 j_2 ; j' m' \rangle$$

$$= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \tag{3.7.42}$$

が得られる．この特別な場合として $j' = j$, $m' = m$ と置いてみると

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} | \langle j_1 j_2 ; m_1 m_2 | j_1 j_2 ; jm \rangle |^2 = 1 \tag{3.7.43}$$

となるが，これはちょうど $| j_1 j_2 ; jm \rangle$ の規格化条件である．

クレプシュ・ゴルダン係数を表わすのに，少し異なる記号を用いる著者もいる．$\langle j_1 j_2 ; m_1 m_2 | j_1 j_2 ; jm \rangle$ の代わりに，時折，$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm \rangle$, $C(j_1 j_2 j ; m_1 m_2 m)$, $C_{j_1 j_2}(jm ; m_1 m_2)$ などといった記号を見かける．これらはまた，**ウィグナーの 3-*j* 記号**を用いて

$$\langle j_1 j_2 ; m_1 m_2 | j_1 j_2 ; jm \rangle$$

$$= (-1)^{j_1 - j_2 + m} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \tag{3.7.44}$$

と書くことができる．時々，文献中に見られる記法である．

クレプシュ・ゴルダン係数に対する漸化式*

ある決められた j_1, j_2 および j に対して，異なる m_1 と m_2 を持つ係数は互いに**漸化式**により関係づけられている．まず

$$J_\pm|j_1j_2;jm\rangle=(J_{1\pm}+J_{2\pm})\sum_{m_1}\sum_{m_2}|j_1j_2;m_1m_2\rangle \times\langle j_1j_2;m_1m_2|j_1j_2;jm\rangle \tag{3.7.45}$$

から出発しよう．(3.5.39)と(3.5.40)を用いると，上式の m_1, m_2 を m_1', m_2' に書きかえて

$$\begin{aligned}&\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|j_1j_2;j,m\pm1\rangle\\&=\sum_{m_1'}\sum_{m_2'}\Big(\sqrt{(j_1\mp m_1')(j_1\pm m_1'+1)}\,|j_1j_2;m_1'\pm1,m_2'\rangle\\&\quad+\sqrt{(j_2\mp m_2')(j_2\pm m_2'+1)}\,|j_1j_2;m_1',\ m_2'\pm1\rangle\Big)\\&\quad\times\langle j_1j_2;m_1'\ m_2'|j_1j_2;jm\rangle\end{aligned} \tag{3.7.46}$$

が得られる．次に左から $\langle j_1j_2;m_1m_2|$ をかけ，直交性を用いる．すると右辺でゼロとならない寄与をするのは，第1項では

$$m_1=m_1'\pm1,\quad m_2=m_2' \tag{3.7.47}$$

だけで，第2項では

$$m_1=m_1',\quad m_2=m_2'\pm1 \tag{3.7.48}$$

だけであることが分かる．こうして，目的とした漸化式

---

* クレプシュ・ゴルダン係数やラカー係数および再結合といったことのさらに詳しい議論は，例えば A. R. Edmonds 1960 に与えられている．

$$\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\langle j_1j_2\,;\,m_1m_2|j_1j_2\,;\,j,\,m\pm 1\rangle$$

$$=\sqrt{(j_1\mp m_1+1)(j_1\pm m_1)}\langle j_1j_2\,;\,m_1\mp 1,\,m_2|j_1j_2\,;\,jm\rangle$$

$$+\sqrt{(j_2\mp m_2+1)(j_2\pm m_2)}\langle j_1j_2\,;\,m_1,\,m_2\mp 1|j_1j_2\,;\,jm\rangle \qquad (3.7.49)$$

が得られる．$J_\pm$ 演算子が m の値をずらしたので，クレプシュ・ゴルダン係数がゼロにならない条件 (3.7.35) は今 [(3.7.49)に適用すると]

$$m_1+m_2=m\pm 1 \qquad (3.7.50)$$

になっていることを特に注意したい．

(3.7.49)を m_1m_2-平面上に表わして，漸化式の持つ意味を理解しよう．J_+ の漸化式（上側の符号）は図3.5a に見られるように，$(m_1,\,m_2)$での係数が$(m_1-1,\,m_2)$と$(m_1,\,m_2-1)$での係数と関係していることを示している．同様に J_- の漸化式（下側の符号）は，図3.5b で与えられている $m_1,\,m_2$ の値の三つの係数を関係づける．

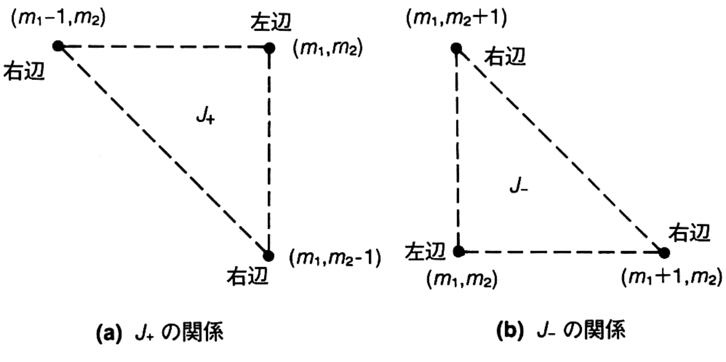


図 3.5. 漸化式(3.7.49)により関係づけられるクレプシュ・ゴルダン係数を表わす m_1m_2-平面

漸化式(3.7.49)と規格化条件(3.7.43)の二つから，すべてのクレプシュ・ゴルダン係数はほとんど一意的に決まる．(“ほとんど一意的に” といったのは，いくつかの符号のとり方はまだ決まらないからである．) 我々の戦略

は次のようである．m_1m_2-平面に戻り，定まった値の j_1，j_2，j に対して

$$|m_1| \leq j_1, \quad |m_2| \leq j_2, \quad -j \leq m_1 + m_2 \leq j \tag{3.7.51}$$

で決められる許される領域の境界を描く．（図3.6a を見よ．）右上の隅の A と書いたところから出発してみよう．はじめに A の近くを調べるので，より詳細な“地図”を用意する．（図3.6b を見よ．）J_- の漸化式(3.7.49)(下の符号)を，A に(m_1, m_2+1)を対応させて適用する．(m_1+1, m_2)に対応する点は $m_1 \leq j_1$ により禁止されるので，漸化式はここで A を B にのみ関係づけることに注意しよう．その結果，B のクレプシュ・ゴルダン係数を A の係数によって表わすことができる．次に A，B，D から作られる J_+ の 3 角形を描く．すると A の係数を決めておくと D の係数が得られる．このような手法を続けていく：B と D を知れば，E が得られる．B と E が分かれば C が得られる……．辛抱強くやればすべての点でのクレプシュ・ゴルダン係数を，出発点の係数を用いて書くことができる．全体の規格化には(3.7.43)を用いる．最後に全体にかかる符号は，慣習に従って決める．（以下の例を参照せよ．）

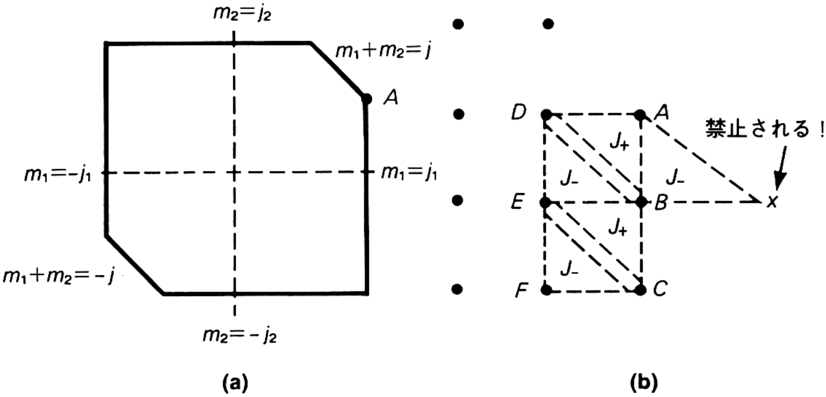


図 3.6. クレプシュ・ゴルダン係数を求めるための漸化式の用法

重要な実例として，スピン1/2の 1 個の粒子の軌道角運動量とスピン

角運動量を合成する問題を考える．このとき

$$j_1 = l \ (\text{整数}),\ \ m_1 = m_l,$$

$$j_2 = s = \frac{1}{2}, \qquad m_2 = m_s = \pm\frac{1}{2} \tag{3.7.52}$$

である．許される j の値は

$$j = l \pm \frac{1}{2},\ \ l>0; \qquad j = \frac{1}{2},\ \ l = 0 \tag{3.7.53}$$

で与えられる．すなわち各々の $l(\neq 0)$ に対し，二つの可能な j の値が存在する．例えば $l=1$ (p 状態) に対しては，分光学の記号で書くと $p_{3/2}$ と $p_{1/2}$ が得られる．この添字は j を表わす．この問題の m_1m_2-平面，すなわち m_lm_s-平面は特に簡単である．許される点は，ただ二つの列を形づくる：上の列は $m_s=\frac{1}{2}$であり，下の列は $m_s=-\frac{1}{2}$ である．図3.7を見よ．特に $j=l+\frac{1}{2}$ の場

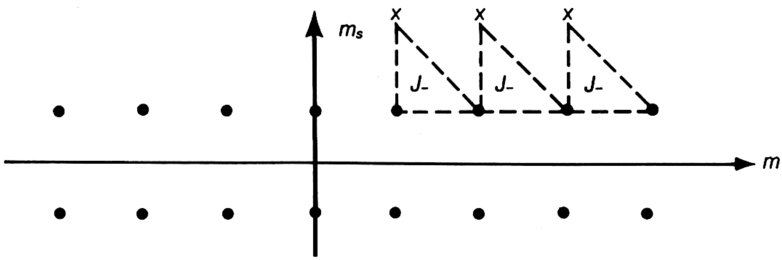


図 3.7. 漸化式を用いてクレプシュ・ゴルダン係数を$j_1=l$, $j_2=s=1/2$のとき求める

合を詳しく調べよう．m_s は $\frac{1}{2}$ を越えられないから，J_- の漸化式をいつも上の列($m_2 = m_s = \frac{1}{2}$)に沿って用いて，新しい J_- の3角形を考えるとき m_l の値が一つだけ変るようにすることができる．クレプシュ・ゴルダン係数を書くとき $j_1 = l$, $j_2 = \frac{1}{2}$ を省いておくと，(3.7.49)式（下側の符号をとる）から[訳註：(3.7.49) の m を $m+1$ で置き換える]

$$\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}+m+1\right)\left(l+\frac{1}{2}-m\right)}\langle m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\,|\,l+\frac{1}{2},m\rangle$$

$$=\sqrt{\left(l+m+\frac{1}{2}\right)\left(l-m+\frac{1}{2}\right)}\langle m+\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}|\,l+\frac{1}{2},\ m+1\rangle \tag{3.7.54}$$

が得られる．ここでは

$$m_1=m_l=m-\frac{1}{2},\ \ m_2=m_s=\frac{1}{2} \tag{3.7.55}$$

を用いた．このように水平に1単位だけ移動することができる：

$$\left\langle m-\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right|l+\frac{1}{2},\ m\Big\rangle$$
$$=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}}\Big\langle m+\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\Big|\,l+\frac{1}{2},\ m+1\Big\rangle. \tag{3.7.56}$$

次に$< m+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\mid l+\frac{1}{2}, m+1 >$を$< m+\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\mid l+\frac{1}{2}, m+2 >$を用いて表わすことができる．以下同様である．明らかにこの手続きはm_lが可能な最大値，lに達するまで続けることができる：

$$\Big\langle m-\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\Big|\,l+\frac{1}{2},\ m\Big\rangle$$

$$=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{l+m+\frac{5}{2}}}\Big\langle m+\frac{3}{2},\ \frac{1}{2}\Big|\,l+\frac{1}{2},\ m+2\Big\rangle$$

$$=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{l+m+\frac{5}{2}}}\sqrt{\frac{l+m+\frac{5}{2}}{l+m+\frac{7}{2}}}$$

$$\times\left\langle m+\frac{5}{2},\ \frac{1}{2}\middle| l+\frac{1}{2},\ m+3\right\rangle$$

$$\vdots$$

$$=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\left\langle l,\ \frac{1}{2}\middle| l+\frac{1}{2},\ l+\frac{1}{2}\right\rangle. \qquad (3.7.57)$$

m_l と m_s が共に最大値，すなわちそれぞれ l と $\frac{1}{2}$ をとる配置を考えよう．全体の $m(=m_l+m_s)$ は $l+\frac{1}{2}$ で，これが可能なのは $j=l-\frac{1}{2}$ でなく $j=l+\frac{1}{2}$ のときに限る．そこで $|m_l=l,\ m_s=\frac{1}{2}>$ は位相因子を別にして $|j=l+\frac{1}{2},\ m=l+\frac{1}{2}>$ に等しくなければならない．慣習に従いこの位相因子を正の実数にとる．このように選ぶと

$$<l,\ \frac{1}{2}|l+\frac{1}{2},\ l+\frac{1}{2}>=1 \qquad (3.7.58)$$

となる．ここで（3.7.57）に戻ると結局

$$<m-\frac{1}{2},\ \frac{1}{2}|l+\frac{1}{2},\ m>=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \qquad (3.7.59)$$

が得られる．

しかしこれはまだ全体の話の $\frac{1}{4}$ に過ぎない．まだこれから次式に現われる疑問符のとる値を，決めなければならない：

$$\left|j=l+\frac{1}{2},\ m\right\rangle=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\left|m_l=m-\frac{1}{2},\ m_s=\frac{1}{2}\right\rangle$$
$$+\ ?\left|m_l=m+\frac{1}{2},\ m_s=-\frac{1}{2}\right\rangle,$$
$$\left|j=l-\frac{1}{2},\ m\right\rangle=\ ?\left|m_l=m-\frac{1}{2},\ m_s=\frac{1}{2}\right\rangle \qquad (3.7.60)$$

$$+ \ ? \left| m_l = m + \frac{1}{2}, \quad m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle.$$

ここで注目するのは，m を決めたとき(m_l, m_s)基底から(j, m)基底への変換行列が，直交性のために

$$\begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \tag{3.7.61}$$

の形をとると期待できることである．(3.7.60)との比較から，$\cos\alpha$ は(3.7.59)そのものであると分かる．すると容易に $\sin\alpha$ を，符号の任意性は別にして決めることができる：

$$\sin^2\alpha = 1 - \frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1} = \frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}. \tag{3.7.62}$$

すべての $j = l + \frac{1}{2}$ 状態は$|j = l + \frac{1}{2},\ m = l + \frac{1}{2}\rangle$ に J_- 演算子を順々にかけることで得られる．J_- の行列要素は習慣上いつも正と決めているので，$\langle m_l = m + \frac{1}{2},\ m_s = -\frac{1}{2}\,|\,j = l + \frac{1}{2},\ m\rangle$ は正でなければならないといえる．したがって 2×2 の変換行列(3.7.61)は

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} & \sqrt{\dfrac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \\ -\sqrt{\dfrac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} & \sqrt{\dfrac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \end{pmatrix} \tag{3.7.63}$$

にほかならない．

ここで2成分形の**スピン-角関数**（spin-angular functions）を次のように定義する：

$$\mathscr{Y}_l^{j=l\pm1/2,\, m} = \pm\sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}\, Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta, \phi)\, \chi_+$$

$$+\sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta, \phi)\, \chi_-$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{l \pm m + \frac{1}{2}}\, Y_l^{m-1/2}(\theta, \phi) \\ \sqrt{l \mp m + \frac{1}{2}}\, Y_l^{m+1/2}(\theta, \phi) \end{pmatrix}. \tag{3.7.64}$$

これはその構成から分かるように $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ および J_z の同時固有関数である．また $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ の固有関数でもあるが，$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ はちょうど

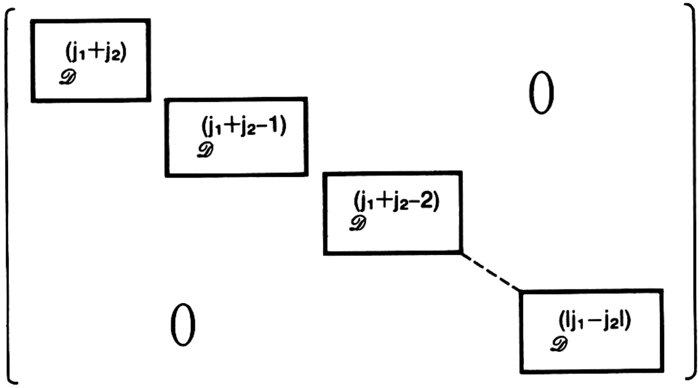
$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2) \tag{3.7.65}$$

であって，独立な演算子でない．実際その固有値は次のように容易に計算できる：

$$\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right] = \begin{cases} \dfrac{l\hbar^2}{2}, & \left(j = l + \dfrac{1}{2}\right) \\ \\ -\dfrac{(l+1)\hbar^2}{2}. & \left(j = l - \dfrac{1}{2}\right) \end{cases} \tag{3.7.66}$$

クレプシュ・ゴルダン係数と回転行列

角運動量の合成は回転行列の観点から議論することもできる．固有値 j_1 を持つ角運動量の固有ケットにより張られるケット空間内での，回転演算子 $\mathscr{D}^{(j_1)}(R)$ を考えよう．同時に $\mathscr{D}^{(j_2)}(R)$ を考える．積 $\mathscr{D}^{(j_1)}(R) \otimes \mathscr{D}^{(j_2)}(R)$ は，基底ケットを適当に選んでおくと行列表現を次の形にとることができるので，可約である：



(3.7.67)

この式は群論の記号で

$$\mathscr{D}^{(j_1)} \otimes \mathscr{D}^{(j_2)} = \mathscr{D}^{(j_1+j_2)} \oplus \mathscr{D}^{(j_1+j_2-1)} \oplus \cdots \oplus \mathscr{D}^{(|j_1-j_2|)} \tag{3.7.68}$$

と書くことができる．回転行列の要素を用いて書くと，**クレプシュ・ゴルダン級数**と呼ばれる重要な展開式が得られる：

$$\mathscr{D}^{(j_1)}_{m_1 m_1'}(R)\mathscr{D}^{(j_2)}_{m_2 m_2'}(R) = \sum_j \sum_m \sum_{m'} \langle j_1 j_2 ; m_1 m_2 | j_1 j_2 ; jm \rangle$$

$$\times \langle j_1 j_2 ; m_1' m_2' | j_1 j_2 ; jm' \rangle \mathscr{D}^{(j)}_{mm'}(R). \tag{3.7.69}$$

ここで j の和は $|j_1 - j_2|$ から $j_1 + j_2$ までとる．この等式の証明は以下のようにできる．はじめに(3.7.69)の左辺が

$$< j_1 j_2 ; m_1 m_2 | \mathscr{D}(R) | j_1 j_2 ; m_1' m_2' >$$

$$= < j_1 m_1 | \mathscr{D}(R) | j_1 m_1' > < j_2 m_2 | \mathscr{D}(R) | j_2 m_2' >$$

$$= \mathscr{D}^{(j_1)}_{m_1 m_1'}(R)\mathscr{D}^{(j_2)}_{m_2 m_2'}(R) \tag{3.7.70}$$

に等しいことに注目しよう．一方，同じ行列要素は(j, m)を基底とする状態の完全系を挿入することによっても計算可能である．すなわち

$$<j_1j_2\,;m_1m_2|\mathscr{D}(R)|j_1j_2\,;m_1'm_2'>$$

$$=\sum_j\sum_m\sum_{j'}\sum_{m'}<j_1j_2\,;m_1m_2|j_1j_2\,;jm><j_1j_2\,;jm|\mathscr{D}(R)|j_1j_2\,;j'm'>$$

$$\times<j_1j_2\,;j'm'|j_1j_2\,;m_1'm_2'>$$

$$=\sum_j\sum_m\sum_{j'}\sum_{m'}<j_1j_2\,;m_1m_2|j_1j_2\,;jm>\mathscr{D}^{(j)}_{mm'}(R)\delta_{jj'}$$

$$\times<j_1j_2\,;m_1'm_2'|j_1j_2\,;j'm'> \tag{3.7.71}$$

となり，ちょうど(3.7.69)の右辺となる．

(3.7.69)の興味ある応用として，三つの球面調和関数を含む積分に対する重要な公式を導く．はじめに(3.6.52)で与えられた$\mathscr{D}^{(l)}_{m0}$とY_l^{m*}との関係を思い出そう．(3.7.69)の中で$j_1\to l_1$, $j_2\to l_2$, $m_1'\to 0$, $m_2'\to 0$（したがって$m'\to 0$）とすると，複素共役をとった後に

$$Y_{l_1}^{m_1}(\theta,\phi)Y_{l_2}^{m_2}(\theta,\phi)=\frac{\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)}}{4\pi}\sum_{l'}\sum_{m'}<l_1l_2\,;m_1m_2|l_1l_2\,;l'm'>$$

$$\times<l_1l_2\,;00|l_1l_2\,;l',0>\sqrt{\frac{4\pi}{2l'+1}}\,Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi) \tag{3.7.72}$$

が得られる．この両辺に$Y_l^{m*}(\theta,\phi)$をかけて立体角で積分する．球面調和関数の直交性により和は落ちて，残るのは

$$\int d\Omega\, Y_l^{m*}(\theta,\phi)Y_{l_1}^{m_1}(\theta,\phi)Y_{l_2}^{m_2}(\theta,\phi)$$

$$=\sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}}<l_1l_2\,;00|l_1l_2\,;l0><l_1l_2\,;m_1m_2|l_1l_2\,;lm> \tag{3.7.73}$$

である．平方根の因子と最初のクレプシュ・ゴルダン係数の積は，方向すなわ

ち m_1 や m_2 によらない．第2のクレプシュ・ゴルダン係数は，l_1 と l_2 を合成して全体の l を作るのに必要なものである．等式(3.7.73)は，3.10節で導くことになるウィグナー・エッカルトの定理の特別な場合であることが分かる．この公式は原子分光や核分光で多重極の行列要素を評価する際，非常に有用である．

3.8 角運動量を表わすシュウィンガーの振動子モデル

結合していない振動子と角運動量

角運動量の代数と二つの独立な（すなわち結合していない）振動子の代数の間に，非常に興味深い関連がある．これはJ. シュウィンガーの講義ノートでよく調べられている [L. C. Biedenharn and H. Van Dam 編，*Quantum Theory of Angular Momentum*，Academic Press (1965)，p. 229 参照]．二つの調和振動子を考え，それぞれをプラス型とマイナス型と呼ぼう．プラス型振動子に対しては消滅および生成演算子を a_+ および $a_+^\dagger$ と記し，同様にマイナス型振動子に対しては a_- および $a_-^\dagger$ と記す．また個数演算子 N_+，N_- を

$$N_+ \equiv a_+^\dagger a_+,\quad N_- \equiv a_-^\dagger a_- \tag{3.8.1}$$

で定義する．同じ型の振動子に対しては a，$a^\dagger$ および N の間に通常の交換関係が成り立つと仮定する（2.3節を見よ）：

$$[a_+, a_+^\dagger] = 1,\qquad [a_-, a_-^\dagger] = 1 \tag{3.8.2a}$$

$$[N_+, a_+] = -a_+,\qquad [N_-, a_-] = -a_- \tag{3.8.2b}$$

$$[N_+, a_+^\dagger] = a_+^\dagger,\qquad [N_-, a_-^\dagger] = a_-^\dagger. \tag{3.8.2c}$$

しかし異なる型の振動子から取った一対の演算子は，常に交換すると仮定する．すなわち

$$[a_+, a_-^\dagger] = [a_-, a_+^\dagger] = 0 \tag{3.8.3}$$

とする．この意味で二つの振動子は結合していないという．

N_+ と N_- は(3.8.3)により交換するから，N_+ と N_- の同時固有ケットでそれぞれの固有値が n_+，n_- のものを作ることができる．そこで $N_\pm$ に対して次のような固有値方程式が得られる：

$$
\begin{aligned}
N_+|n_+, n_->&=n_+|n_+, n_->, \\
N_-|n_+, n_->&=n_-|n_+, n_->.
\end{aligned}
\tag{3.8.4}
$$

(2.3.16)と(2.3.17)に完全に対応して，生成演算子 $a_\pm^\dagger$ と消滅演算子 $a_\pm$ は，$|n_+, n_->$に次のように作用する：

$$
\begin{aligned}
a_+^\dagger|n_+, n_->&=\sqrt{n_+ + 1}|n_+ + 1, n_->, \\
a_-^\dagger|n_+, n_->&=\sqrt{n_- + 1}|n_+, n_- + 1>,
\end{aligned}
\tag{3.8.5a}
$$

$$
\begin{aligned}
a_+|n_+, n_->&=\sqrt{n_+}|n_+ - 1, n_->, \\
a_-|n_+, n_->&=\sqrt{n_-}|n_+, n_- - 1>.
\end{aligned}
\tag{3.8.5b}
$$

N_+，N_- の最も一般的な固有ケットは，次式で定義される**真空ケット**

$$
a_+|0, 0>=0, \qquad a_-|0, 0>=0 \tag{3.8.6}
$$

に，$a_+^\dagger$ および $a_-^\dagger$ を順々にかけていくことにより求められる．このようにして

$$
|n_+, n_->=\frac{(a_+^\dagger)^{n_+}(a_-^\dagger)^{n_-}}{\sqrt{n_+!}\sqrt{n_-!}}|0, 0> \tag{3.8.7}
$$

が得られる．次に

$$
J_+\equiv\hbar a_+^\dagger a_-, \qquad J_-\equiv\hbar a_-^\dagger a_+ \tag{3.8.8a}
$$

および

$$J_z \equiv \frac{\hbar}{2}(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-) = \frac{\hbar}{2}(N_+ - N_-) \tag{3.8.8b}$$

を定義する．これらの演算子が，通常の形の角運動量の交換関係

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm \tag{3.8.9a}$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \tag{3.8.9b}$$

を満足することは容易に確かめられる．例えば(3.8.9b)は次のようにして証明できる：

$$\hbar^2[a_+^\dagger a_-, a_-^\dagger a_+] = \hbar^2 a_+^\dagger a_- a_-^\dagger a_+ - \hbar^2 a_-^\dagger a_+ a_+^\dagger a_-$$

$$= \hbar^2 a_+^\dagger(a_-^\dagger a_- + 1)a_+ - \hbar^2 a_-^\dagger(a_+^\dagger a_+ + 1)a_-$$

$$= \hbar^2(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-) = 2\hbar J_z\ . \tag{3.8.10}$$

全体の N を

$$N \equiv N_+ + N_- = a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_- \tag{3.8.11}$$

で定義すると

$$\boldsymbol{J}^2 \equiv J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+)$$

$$= \left(\frac{\hbar^2}{2}\right)N\left(\frac{N}{2} + 1\right) \tag{3.8.12}$$

も証明できるが，これは演習問題に残しておく．

以上の式は物理的にどう解釈できるであろうか．我々は上向きスピン$(m=\frac{1}{2})$にプラス型振動子の一量子単位を，下向きスピン$(m=-\frac{1}{2})$にマイナス型振動子の一量子単位を関連づけているのである．あるいはプラス（マイナス）型振動子の各量子単位に，1個のスピン$\frac{1}{2}$のスピン上向き（下向き）の

“粒子”を想定してもよい．固有値 n_+, n_- はそれぞれちょうど上向きスピン，下向きスピンの個数である．J_+ の意味はスピン角運動量の z-成分が $-\hbar/2$ である下向きスピン1単位を壊し，スピン角運動量の z-成分が $\hbar/2$ である上向きスピン1単位を作ることである．したがって角運動量の z-成分は $\hbar$ だけ増加する．同様に J_- は上向きスピン1単位を壊し，下向きスピン1単位を作る．したがって角運動量の z-成分は $\hbar$ だけ減少する．演算子 J_z の役割はというと，n_+ と n_- の差の $\hbar/2$倍，ちょうど全角運動量の z-成分を数えている．(3.8.5) を自在に用いると，$J_\pm$ や J_z が $|n_+, n_->$ にどのように作用するか容易に調べることができ，次のような結果が得られる：

$$J_+|n_+, n_-> = \hbar a_+^\dagger a_-|n_+, n_->$$

$$= \sqrt{n_-(n_+ + 1)}\hbar\,|n_+ + 1,\ n_- - 1> \ , \quad (3.8.13a)$$

$$J_-|n_+, n_-> = \hbar a_-^\dagger a_+|n_+, n_->$$

$$= \sqrt{n_+(n_- + 1)}\hbar\,|n_+ - 1,\ n_- + 1> \ , \quad (3.8.13b)$$

$$J_z|n_+, n_-> = \frac{\hbar}{2}(N_+ - N_-)|n_+, n_-> = \frac{1}{2}(n_+ - n_-)\hbar\,|n_+, n_->. \quad (3.8.13c)$$

これらのすべての演算で，スピン1/2の粒子の総数に対応する和 $n_+ + n_-$ は不変であることに注意しよう．

(3.8.13a)，(3.8.13b)および(3.8.13c)は，3.5節で導いた演算子 $J_\pm$, J_z に対するよく知られた表式に変形されることに注目しよう．それには

$$n_+ \to j+m, \qquad n_- \to j-m \quad (3.8.14)$$

と置き換えればよい．(3.8.13a)，(3.8.13b)中の平方根の因子は

$$\sqrt{n_-(n_+ + 1)} \to \sqrt{(j - m)(j + m + 1)},$$

$$\sqrt{n_+(n_- + 1)} \to \sqrt{(j + m)(j - m + 1)} \quad (3.8.15)$$

に変わり，これは (3.5.39) および (3.5.40) に現われた平方根の因子と厳密に一致する．また(3.8.12)で定義された演算子 $\boldsymbol{J}^2$ の固有値も，次のように変形されることに注目しよう：

$$\left(\frac{\hbar^2}{2}\right)(n_+ + n_-)\left[\frac{(n_+ + n_-)}{2} + 1\right] \to \hbar^2 j(j+1) . \tag{3.8.16}$$

振動子の演算子から構成した $J_\pm$ と $\boldsymbol{J}^2$ の演算子が，通常の角運動量の交換関係を満足することは証明済なので，以上すべてはあまり驚くようなことでないであろう．しかし，振動子の行列要素と角運動量の行列要素との関連を具体的にみることは，教育的である．とにかくいま $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の同時固有ケットを特徴づけるのに，n_+ と n_- に代わって

$$j \equiv \frac{n_+ + n_-}{2},\quad m \equiv \frac{n_+ - n_-}{2} \tag{3.8.17}$$

を用いるのは自然である．(3.8.13a)によれば，J_+ の作用は n_+ を $n_+ + 1$ に，n_- を $n_- - 1$ に変える．すなわち j は不変で m は $m+1$ に増える．同じように演算子 J_- は n_+ を $n_+ - 1$ に n_- を $n_- + 1$ に変え，j を不変のまま m を 1 単位減らしている．そこで一般の N_+，N_- の固有ケットに対する(3.8.7)を

$$|j, m\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{j+m}(a_-^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0\rangle \tag{3.8.18}$$

と書くことができる．ここで真空ケットとして用いた $|0\rangle$ は，以前 $|0, 0\rangle$ と記していたものである．

(3.8.18)の特別な場合が興味深い．$m=j$ と置こう．物理的には，与えられた j に対して J_z の固有値がもっとも大きな場合である．このとき

$$|j, j\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}|0\rangle \tag{3.8.19}$$

である．この状態はスピン1/2の $2j$ 個の粒子がスピンをすべて z-軸の正方向に向けている状態と想像できよう．

一般に大きな j を持つ複雑な系は，単純なスピン1/2の粒子から作られていて，その中の $j+m$ 個が上向きスピンで残りの $j-m$ 個が下向きスピンであるというようにとらえられることに注目しよう．この描像は，明らかに角運動量 j の系がいつも文字通りスピン1/2の粒子の複合系であるとは見なせないにも拘らず，著しく便利である．ここで述べていることはただ，回転における変換の性質に関する限り角運動量 j の任意の対象を，(3.8.18)で示された手法で $2j$ 個のスピン1/2の粒子から作られた複合系であると見なしてよいということである．

前節で展開した，角運動量の合成の視点から見ると，$2j$ 個のスピン1/2の粒子のスピンを合成すれば，角運動量が j，$j-1$，$j-2$，……の状態が得られることになる．簡単な例でいうと，2個のスピン1/2粒子のスピン角運動量を合成すれば，全角運動量がゼロと1が共に得られる．しかし，シュウィンガーの振動子のモデルでは，$2j$ 個のスピン1/2粒子から出発すると，角運動量が j の状態だけが得られる．第6章で展開する置換対称の言葉を使うと，この方法で作成されるのは完全対称状態だけなのである．ここに現われた基本のスピン1/2粒子は，何とボソンであった！　この方法が適しているのは，j と m で表わされる状態が回転を受けるときの性質を，この状態がもともとどのように作られているかは問題にしないで，調べたいときである．

核や素粒子の物理で使われているアイソスピンをよく知っている読者は，ここで述べたことがアイソスピン（またはアイソトーピックスピン）の形式論に新しい洞察を与えていることに気付いたであろう．演算子 J_+ はマイナス型を1単位消しプラス型を1単位作るが，これはアイソスピンのはしご演算子 T_+（時に I_+ と記す）と全く類似している．後者は中性子（アイソスピン下向き）を1個消し，陽子（アイソスピン上向き）を1個作ることで，アイソスピンの z-成分を1単位増やす．これに対し J_z は，単に核内の陽子と中性子の

数の差を数えあげる T_z と類似している.

回転行列に関する具体的な公式

シュウィンガーの方法は，回転行列に対するある閉じた形の公式を非常に簡単な仕方で導くのに使うことができる．その公式は最初 E. P. ウィグナーによって同様な（しかし同値ではない）方法を用いて得られた．回転演算子 $\mathscr{D}(R)$ を，(3.8.18)で書かれた $|j, m\rangle$ に作用させよう．オイラー角の記法では，自明でないただ一つの回転は y 軸の回りの第 2 の回転であるから，我々の注意を

$$\mathscr{D}(R) = \mathscr{D}(\alpha, \beta, \gamma)\Big|_{\alpha=\gamma=0} = \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) \tag{3.8.20}$$

に向けよう．すると

$$\mathscr{D}(R)|j, m\rangle = \frac{[\mathscr{D}(R)a_+^\dagger\mathscr{D}^{-1}(R)]^{j+m}[\mathscr{D}(R)a_-^\dagger\mathscr{D}^{-1}(R)]^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\mathscr{D}(R)|0\rangle \tag{3.8.21}$$

となる．いま $\mathscr{D}(R)$ を $|0\rangle$ に作用させると $|0\rangle$ が再現する．それは(3.8.6)により，(3.8.20)の指数関数の展開で最初の項 1 だけが寄与するからである．そこで次に

$$\mathscr{D}(R)a_\pm^\dagger\mathscr{D}^{-1}(R) = \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)a_\pm^\dagger\exp\left(\frac{iJ_y\beta}{\hbar}\right) \tag{3.8.22}$$

を調べる．ここで公式(2.3.47)を使うことができる．(2.3.47)で

$$G \to \frac{-J_y}{\hbar},\quad \lambda \to \beta \tag{3.8.23}$$

と置くと，いま調べなければならないのは種々の交換子，すなわち

$$\left[\frac{-J_y}{\hbar},\ a_+^\dagger\right] = \frac{1}{2i}[a_-^\dagger a_+,\ a_+^\dagger] = \frac{1}{2i}a_-^\dagger,$$

$$\left[\frac{-J_y}{\hbar},\ \left[\frac{-J_y}{\hbar},\ a_+^\dagger\right]\right]=\left[\frac{-J_y}{\hbar},\ \frac{a_-^\dagger}{2i}\right]=\frac{1}{4}a_+^\dagger \tag{3.8.24}$$

などであることが分かる．明らかに，常に $a_+^\dagger$ か $a_-^\dagger$ かが得られる．これらの項を集めると

$$\mathscr{D}(R)\,a_+^\dagger\,\mathscr{D}^{-1}(R)=a_+^\dagger\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)+a_-^\dagger\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \tag{3.8.25}$$

が得られる．同じようにすると

$$\mathscr{D}(R)\,a_-^\dagger\,\mathscr{D}^{-1}(R)=a_-^\dagger\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)-a_+^\dagger\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \tag{3.8.26}$$

が得られる．実際この結果は自然である．y-軸の回りの回転により，基本となるスピン上向き状態は

$$a_+^\dagger|0\rangle\rightarrow\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)a_+^\dagger|0\rangle+\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)a_-^\dagger\,|0\rangle \tag{3.8.27}$$

のように変換されると考えられるからである．(3.8.25)と(3.8.26)を(3.8.21)に代入し，二項定理

$$(x+y)^N=\sum_k\frac{N!\,x^{N-k}y^k}{(N-k)!k!} \tag{3.8.28}$$

を用いると

$$\begin{aligned}&\mathscr{D}(\alpha=0,\beta,\gamma=0)|j,\ m\rangle\\&=\sum_k\sum_l\frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+m-k)!\,k!\,(j-m-l)!\,l!\,\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\\&\quad\times\left[a_+^\dagger\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]^{j+m-k}\left[a_-^\dagger\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]^k\\&\quad\times\left[-a_+^\dagger\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]^{j-m-l}\left[a_-^\dagger\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]^l|0\rangle\end{aligned} \tag{3.8.29}$$

が得られる．(3.8.29)を［(3.5.51) を用いて］

$$\mathscr{D}(\alpha=0,\ \beta,\ \gamma=0)|j, m\rangle=\sum_{m'}|j, m'\rangle d^{(j)}_{m'm}(\beta)$$

$$=\sum_{m'} d^{(j)}_{m'm}(\beta)\frac{(a^\dagger_+)^{j+m'}(a^\dagger_-)^{j-m'}}{\sqrt{(j+m')!\,(j-m')!}}|0\rangle \tag{3.8.30}$$

と比較するとよい．(3.8.29)と(3.8.30)の中の，$a^\dagger_+$ のべきの係数を等しいと置くと，$d^{(j)}_{m'm}(\beta)$ に対する具体的な形が得られる．そこで(3.8.30)式中の $a^\dagger_+$ の $j+m'$ 乗と(3.8.29)式中の $a^\dagger_+$ の $2j-k-l$ 乗を比較しよう．そうすると

$$l=j-k-m' \tag{3.8.31}$$

と決まる．求めているのはある定まった m' に対する $d^{(j)}_{m'm}(\beta)$ である．このとき(3.8.29)中の k の和と l の和は互いに独立でない．(3.8.31)を利用して l を消去し k で表わす．$a^\dagger_-$ のべきについては，(3.8.30)の $a^\dagger_-$ の $j-m'$ 乗と(3.8.29)の $a^\dagger_-$ の $k+l$ 乗とは，(3.8.31)が成り立つとき自動的に合致することに注意する．最後に $\cos(\beta/2)$，$\sin(\beta/2)$ および(-1)のべきを決めなくてはならない．これらは(3.8.31)を用いて l を消去し，それぞれ

$$j+m-k+l=2j-2k+m-m', \tag{3.8.32a}$$

$$k+j-m-l=2k-m+m', \tag{3.8.32b}$$

$$j-m-l=k-m+m' \tag{3.8.32c}$$

となる．こうして $d^{(j)}_{m'm}(\beta)$ に対する**ウィグナーの公式**が得られた：

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta)$$
$$=\sum_k (-1)^{k-m+m'}\frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+m')!\,(j-m')!}}{(j+m-k)!\,k!\,(j-k-m')!\,(k-m+m')!}$$

$$\times\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2k-m+m'} \tag{3.8.33}$$

上式で k についての和は，分母中の階乗の変数が一つも負にならない範囲でとる．

3.9　スピン相関の測定とベルの不等式

スピン1重項状態での相関

3.7節で学んだ角運動量の合成の最も簡単な例は，スピン1/2の粒子からなる複合系に関するものであった．この節ではそのような系を扱い，量子力学の最も驚くべき帰結の一つを説明しよう．

スピン1重項，すなわち全スピンがゼロの状態にある2電子系を考えよう．既に見たように，量子化軸の向きをあらわに示すとこのときの状態ケットは

$$|\text{スピン1重項}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{z}+;\hat{z}-\rangle-|\hat{z}-;\hat{z}+\rangle) \tag{3.9.1}$$

のように書ける［(3.7.15d)参照］．$|\hat{z}+;\hat{z}-\rangle$ は電子1がスピン上向き状態に，電子2がスピン下向き状態にあることを意味する．$|\hat{z}-;\hat{z}+\rangle$ についても同様である．

一方の電子のスピン成分を測定することを考えよう．複合系が $|\hat{z}+;\hat{z}-\rangle$ にある確率も $|\hat{z}-;\hat{z}+\rangle$ にある確率も等しいので，上向きないし下向きのスピンが得られる割合は明らかに50対50である．しかし複合系の一つが上向きスピン状態にあると分かったら，他の一つは必然的に下向きスピン状態にあり，その逆も成り立つ．電子1のスピン成分が上向きであることが示されたとき，測定装置は(3.9.1)の第1項 $|\hat{z}+;\hat{z}-\rangle$ を選び出している．引き続いて行う電子2のスピン成分に関する測定は，複合系の状態ケットが

$|\hat{z}+;\hat{z}-\rangle$ で与えられることを確認するに違いない.

驚くべきことは，二つの粒子が飛び離れていくときにスピン状態の変化がないとしたら，2粒子が十分に離れて互いに相互作用をしないようになってもこうした相関が保たれていることである．$J=0$ の系がひとりでに2個のスピン1/2の粒子に崩壊し相対運動の軌道角運動量を持たないときは，崩壊過程で角運動量の保存が成立しなければならないのでたしかにこうなる．この一例は η 中間子（質量549Mev/c^2）がミュー粒子対に崩壊する稀に起る過程

$$\eta \to \mu^+ + \mu^- \tag{3.9.2}$$

であろうが，残念ながらこの分岐比は約 6×10^{-6} しかない．もっと現実的なのは，低い運動エネルギーでの陽子-陽子散乱である．このとき第6章で議論するパウリの原理によって，相互作用している2陽子は $^1S_0$（軌道角運動量0，スピン1重項状態）にならなければならないので，散乱された陽子のスピン状態はたとえ粒子が巨視的距離離れた後にも，(3.9.1)で示されたような相関を保たなければならない．

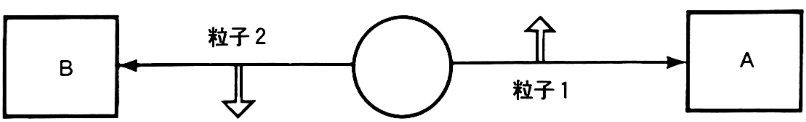


図 3.8.　スピン1重項状態でのスピン相関

もっと絵で書いたようにいうと，図3.8のように逆方向に進む2個のスピン1/2の粒子からなる系を考える．観測者Aは粒子1（右側へ飛行）の S_z の測定に専念し，一方，観測者Bは粒子2（左側へ飛行）の S_z の測定に専念する．特にここで観測者Aが，粒子1の S_z を正であると見出したとしよう．するとその観測者は，Bが測定を実行する前であっても，Bの測定結果を確実に予言できる：Bは粒子2に対し，S_z が負であることを見出すに違いないと．

一方もしAが測定をしないと，Bが S_z+ ないし S_z- を得る割合は50対50である．

これ自身はそう特別なことでないかも知れない．次のようにもいえるであろう．“これはちょうど，黒と白のボールが一つずつ入っていると分かっているつぼのようなものだ，目をつぶってボールを一つ取り出したら，黒か白である割合は50対50である．しかし初めに取り出したボールが黒ならば，2番目のボールが白であることは，確実に予言できる．”

この類推はあまりにも単純であることが分かる．現実の量子力学的世界は，もっとずっと複雑なものである！　なぜかというと観測者は，S_z の代わりに S_x を測定することにしてもよいからである．同じ“量子力学的ボール”の対が，黒と白ともあるいは青と赤とも分析できるのである．

ここで1個のスピン1/2の系で，S_x の固有ケットと S_z の固有ケットが次のように関連していることを思い出そう：

$$|\hat{\mathbf{x}}\pm> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{\mathbf{z}}+> \pm |\hat{\mathbf{z}}->),\ \ |\hat{\mathbf{z}}\pm> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{\mathbf{x}}+> \pm |\hat{\mathbf{x}}->). \tag{3.9.3}$$

いま扱っている複合系にもどると，スピン1重項のケット（3.9.1)を，量子化軸として x 方向を選んで

$$|\text{スピン1重項}> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{\mathbf{x}}-;\hat{\mathbf{x}}+> - |\hat{\mathbf{x}}+;\hat{\mathbf{x}}->) \tag{3.9.4}$$

と書き換えることができる．全体にかかる符号はいずれにせよ慣習的なものなので別にすれば，スピン1重項状態では空間的にこれという方向がないので，この形は(3.9.1)より直接推測することができたであろう．いま観測者Aはスピン分析装置の方向を変えることで，粒子1の S_z を測定するか S_x を測定するかが選べ，一方観測者Bはずっと粒子2の S_x を測ることに専念しているとしよう．もしAが粒子1の S_z を正と決めたなら，明らかにBが S_x+ か S_x-

かを得る割合は50対50である．粒子2のS_zは確かに負であると分かっていても，S_xは全く未定なのである．一方AもS_xを測定することにしたとしよう．観測者Aが粒子1のS_xを正と確定したとすると，間違いなく，観測者Bは粒子2のS_xを負と測定するであろう．最後に，Aが何の測定もしないとしたら，もちろんBがS_x+ないしS_x-を得る割合は50対50である．これらをまとめてみる：

1．AがS_zを測りBがS_xを測るとき，二つの測定の間の相関は全くランダムである．

2．AがS_xを測りBがS_xを測るとき，二つの測定の間には100％（符号は逆）の相関がある．

3．Aが測定をしないとすると，Bの測定はラシダムな結果を示す．

表3.1にはBとAがS_xないしS_zの測定を選択できるとき，このような測定のすべての可能な結果が示されている．

表 3.1.　スピン相関の測定

Aの測定するスピン成分	Aの結果	Bの測定するスピン成分	Bの結果
z	＋	z	－
z	－	x	＋
x	－	z	－
x	－	z	＋
z	＋	x	－
x	＋	x	－
z	＋	x	＋
x	－	x	＋
z	－	z	＋
z	－	x	－
x	＋	z	＋
x	＋	z	－

こうした考察からBの測定結果は，Aがどのような測定をすると決めたかによっているかのように思われる．S_xを測るかS_zを測るか，何も測らないかである．AとBとが何マイルも離れていて，通信したり互いに作用し

あうことが不可能な場合でもよいことをもう一度注意しよう．また観測者Aは自分のスピン分析装置をどの方向に向けるかを，二つの粒子が離れた後ずっとたってから決めることができる．粒子2はあたかも，粒子1のどのスピン成分が測られるかを“知っている”かのようである．

この状況に対する正統的な量子力学的解釈は次のようである．測定は選択（沪過）過程である．粒子1のS_zを測って正であったとすると，$|\hat{z}+;\hat{z}->$成分が選ばれる．これに続く，もう一方の粒子のS_zの測定は，系が依然$|\hat{z}+;\hat{z}->$にあることをただ確認するだけである．系の一部分とみなせるものの測定でも，系全体を測定していると考えなければならないのである．

アインシュタインの局所原理とベルの不等式

多くの物理学者たちは，スピン相関の測定についての上記の正統的解釈に不満であった．彼等の感情は，よく引き合いに出される次のA. アインシュタインの言葉に代表される．これを**アインシュタインの局所原理**という：“しかし私の考えでは，絶対に固持しなければならない一つの仮定がある．それは，系S_2の真の実際の状態[†]は，空間的に離れた系S_1で何がなされるかには依らないということである．”この問題は1935年に，A. アインシュタイン，B. ポドルスキー，N. ローゼンの論文ではじめて議論されたので，アインシュタイン・ポドルスキー・ローゼンのパラドックスという名でも知られている[*]．

何人かの人達は，ここに出会った困難は量子力学の確率的解釈に固有なもので，微視的レベルの力学的ふるまいが確率的に見えるのは，単にある未知のパラメーター——いわゆる隠れた変数——が指定されていないためであると主張していた．隠れた変数ないしそれ以外の幾つかの考えに基づいた様々な「量子力学に代わる理論」を議論するのは，我々のここでの目的でない．その代わりにそうした理論が，量子力学の予測とは異なる予測をするかどうかを問

---

* 歴史的に正確にいうと，アインシュタイン・ポドルスキー・ローゼンの原論文では，xとpの測定が扱われていた．アインシュタイン・ポドルスキー・ローゼンのパラドックスを，スピン1/2の複合系を使って説明するのは，D. ボームが始めたことである．

† 訳注：the real factual situation の訳

題にしてみよう．1964年迄考えられていたことは，代わりとなる理論が作り上げられたとしてもその理論の予測で実験的に確かめられるものは，通常の量子力学の予測と一致するであろうということであった．したがってすべての論争は物理学というよりも形而上学の領域に属するものであった．ところが，J.S. ベルはアインシュタインの局所原理に基づいた「量子力学に代わる理論」は実際，スピン相関実験の観測量の間に一つの試すことのできる不等式関係を予測すること，そしてそれは量子力学の予測とは一致しないことを指摘した†.

ここではベルの不等式を，E. P. ウィグナーによって考え出された簡単なモデルの範囲で導こう．これは代わりとなる様々な理論の本質的特徴を取り入れている．このモデルの提案者達は，S_x と S_z が同時には決定できないということを承知している．しかしスピン1/2粒子が多数あるときは，その中のある部分に次の性質を持たせることにする：

S_z を測定すると，確かに正の符号が得られる．

S_x を測定すると，確かに負の符号が得られる．

この性質を満たす粒子を，$(\hat{z}+, \hat{x}-)$型に属するという．注意して欲しいのは S_z と S_x がそれぞれ + と − であるといっても同時に測定できると主張しているのではない．S_z を測るときは S_x を測ってはいないし，その逆もそうである．2方向以上のスピン成分に決まった値を割り振るときの了解事項として，実際に測定できるのはどれか一つの成分だけであるとする．この方法は量子力学の方法とは基本的に異なっているものの，スピン上向き(S_z+)状態でなされた S_z と S_x の測定に関する量子力学的予測は，$(\hat{z}+, \hat{x}+)$型に属する粒子と$(\hat{z}+, \hat{x}-)$型に属する粒子が同数であるとすると，再現される．

ここでこのモデルが，スピン1重項の複合系に対してなされたスピン相関の測定結果を，どのように説明できるかを調べよう．明らかに対を一つ決めれば，粒子1と粒子2の間には全角運動量をゼロにするために，きちんとしたつりあいがなければならない．もし粒子1が$(\hat{z}+, \hat{x}-)$型であると，粒子2は$(\hat{z}-, \hat{x}+)$型に属さなければならないという具合である．表3.1にあるような相関の測定結果は，粒子1と粒子2が次のように組みあっていてそれぞ

† 訳注：J.S. Bell, *Physics* 1 (1964), 195.

れに等しく25％の分布をしていると再現できる．

$$\begin{array}{ccc} \text{粒子 1} & & \text{粒子 2} \\ (\hat{\boldsymbol{z}}+,\hat{\boldsymbol{x}}-) & \leftrightarrow & (\hat{\boldsymbol{z}}-,\hat{\boldsymbol{x}}+) \end{array} \tag{3.9.5a}$$

$$(\hat{\boldsymbol{z}}+,\hat{\boldsymbol{x}}+) \leftrightarrow (\hat{\boldsymbol{z}}-,\hat{\boldsymbol{x}}-) \tag{3.9.5b}$$

$$(\hat{\boldsymbol{z}}-,\hat{\boldsymbol{x}}+) \leftrightarrow (\hat{\boldsymbol{z}}+,\hat{\boldsymbol{x}}-) \tag{3.9.5c}$$

$$(\hat{\boldsymbol{z}}-,\hat{\boldsymbol{x}}-) \leftrightarrow (\hat{\boldsymbol{z}}+,\hat{\boldsymbol{x}}+) \tag{3.9.5d}$$

非常に重要な仮定が，ここに含まれている．ある一つの対が(3.9.5a)の型に属し，観測者Aは粒子1のS_zを測ると決めたとする．するとその観測者Aは，BがS_zを測ると決めようと，S_xを測ると決めようと必然的にS_zに関して正の符号を得る．この意味でアインシュタインの局所原理が，このモデルに取り入れられている：Aの結果はBが何を測定するかということとは独立にあらかじめ決まっている．

今迄考えた例では，このモデルは量子力学の予測を再現するのに成功している．ここでもっと複雑な状況を考え，このモデルが普通の量子力学の予測とは異なる予測を導くことを示そう．こんどは三つの単位ベクトル$\hat{\boldsymbol{a}}$，$\hat{\boldsymbol{b}}$，$\hat{\boldsymbol{c}}$を考えるが，これらは一般に互いに直交していない．仮に粒子の一つがある決まった型，例えば($\hat{\boldsymbol{a}}-$，$\hat{\boldsymbol{b}}+$，$\hat{\boldsymbol{c}}+$)に属するとする．この意味は，$\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{a}}$を測ると確実に負の符号が，$\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{b}}$を測ると確実に正の符号が，$\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{c}}$を測ると確実に正の符号が得られることを意味する．全角運動量をゼロにするために，1重項の他方の粒子は必然的に($\hat{\boldsymbol{a}}+$，$\hat{\boldsymbol{b}}-$，$\hat{\boldsymbol{c}}-$)に属し，この意味で再びつりあいは完全でなければならない．いずれにせよ問題にする粒子対は，表3.2にあげた8通りの型の中の一つに属していなければならない．これらの八つの可能性は互いに排他的で分離している．第1列に示してあるのはそれぞれの型への粒子対の分布数である．

観測者Aが正の値の$\boldsymbol{S}_1\cdot\hat{\boldsymbol{a}}$を見出し，観測者Bもまた正の値の$\boldsymbol{S}_2\cdot\hat{\boldsymbol{b}}$を見出したとしよう．表3.2から明らかなように，この対は3型か4型

表 3.2. 「量子力学に代わる理論」でのスピン成分の組合せ

対の分布数	粒子 1	粒子 2
N_1	$(\hat{\boldsymbol{a}}+, \hat{\boldsymbol{b}}+, \hat{\boldsymbol{c}}+)$	$(\hat{\boldsymbol{a}}-, \hat{\boldsymbol{b}}-, \hat{\boldsymbol{c}}-)$
N_2	$(\hat{\boldsymbol{a}}+, \hat{\boldsymbol{b}}+, \hat{\boldsymbol{c}}-)$	$(\hat{\boldsymbol{a}}-, \hat{\boldsymbol{b}}-, \hat{\boldsymbol{c}}+)$
N_3	$(\hat{\boldsymbol{a}}+, \hat{\boldsymbol{b}}-, \hat{\boldsymbol{c}}+)$	$(\hat{\boldsymbol{a}}-, \hat{\boldsymbol{b}}+, \hat{\boldsymbol{c}}-)$
N_4	$(\hat{\boldsymbol{a}}+, \hat{\boldsymbol{b}}-, \hat{\boldsymbol{c}}-)$	$(\hat{\boldsymbol{a}}-, \hat{\boldsymbol{b}}+, \hat{\boldsymbol{c}}+)$
N_5	$(\hat{\boldsymbol{a}}-, \hat{\boldsymbol{b}}+, \hat{\boldsymbol{c}}+)$	$(\hat{\boldsymbol{a}}+, \hat{\boldsymbol{b}}-, \hat{\boldsymbol{c}}-)$
N_6	$(\hat{\boldsymbol{a}}-, \hat{\boldsymbol{b}}+, \hat{\boldsymbol{c}}-)$	$(\hat{\boldsymbol{a}}+, \hat{\boldsymbol{b}}-, \hat{\boldsymbol{c}}+)$
N_7	$(\hat{\boldsymbol{a}}-, \hat{\boldsymbol{b}}-, \hat{\boldsymbol{c}}+)$	$(\hat{\boldsymbol{a}}+, \hat{\boldsymbol{b}}+, \hat{\boldsymbol{c}}-)$
N_8	$(\hat{\boldsymbol{a}}-, \hat{\boldsymbol{b}}-, \hat{\boldsymbol{c}}-)$	$(\hat{\boldsymbol{a}}+, \hat{\boldsymbol{b}}+, \hat{\boldsymbol{c}}+)$

のどちらかに属する．従ってこれが実現するような粒子対の数は，$N_3 + N_4$である．N_i は負にならないから

$$N_3 + N_4 \leqq (N_2 + N_4) + (N_3 + N_7) \tag{3.9.6}$$

という不等式が成り立たなければならない．無作為の選択で観測者 A が正の $\boldsymbol{S}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{a}}$ を，観測者 B が正の $\boldsymbol{S}_2 \cdot \hat{\boldsymbol{b}}$ を測定する確率を $P(\hat{\boldsymbol{a}}+; \hat{\boldsymbol{b}}+)$ などとしよう．明らかに

$$P(\hat{\boldsymbol{a}}+; \hat{\boldsymbol{b}}+) = \frac{N_3 + N_4}{\sum_i^8 N_i} \tag{3.9.7}$$

である．同様にして

$$P(\hat{\boldsymbol{a}}+; \hat{\boldsymbol{c}}+) = \frac{N_2 + N_4}{\sum_i^8 N_i}$$

および

$$P(\hat{\boldsymbol{c}}+; \hat{\boldsymbol{b}}+) = \frac{N_3 + N_7}{\sum_i^8 N_i} \tag{3.9.8}$$

が得られる．分布数が正である条件(3.9.6)は

$$P(\hat{\boldsymbol{a}}+;\hat{\boldsymbol{b}}+)\leqq P(\hat{\boldsymbol{a}}+;\hat{\boldsymbol{c}}+)+P(\hat{\boldsymbol{c}}+;\hat{\boldsymbol{b}}+) \tag{3.9.9}$$

となる．これが**ベルの不等式**であり，アインシュタインの局所原理から導かれるものである．

量子力学とベルの不等式

ここで量子力学の世界に戻ろう．量子力学では粒子対のある割合，例えば $N_3/\sum_i^8 N_i$ が第3の型に属するなどとはいわない．そうではなくてすべてのスピン1重項の系を，同じケット(3.9.1)で記述する．このとき関係あるのは3.4節の言葉でいう純粋状態である．このケットと，今迄説明してきた量子力学の規則を用いると，不等式(3.9.9)の3項のそれぞれを，あいまいさなしに計算できる．

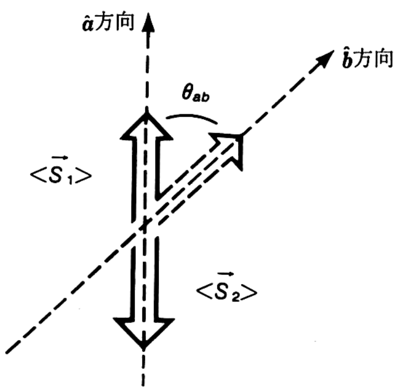


図 3.9.　$P(\hat{a}+;\hat{b}+)$の評価

はじめに $P(\hat{\boldsymbol{a}}+;\hat{\boldsymbol{b}}+)$ を評価しよう．観測者Aが $\boldsymbol{S}_1\cdot\hat{\boldsymbol{a}}$ を測って正であったとすると，前に述べたような100%の（異符号の）相関があるために，Bは $\boldsymbol{S}_2\cdot\hat{\boldsymbol{a}}$ を測って必ず負の符号を得る．しかし $P(\hat{\boldsymbol{a}}+;\hat{\boldsymbol{b}}+)$ を計算するには，$\hat{\boldsymbol{a}}$ と角度 θ_{ab} をなす新しい量子化軸 $\hat{\boldsymbol{b}}$ を考えなければならない．

（図3.9を見よ．）3.2節の理論によれば，粒子２が $\boldsymbol{S}_2\cdot\hat{\boldsymbol{a}}$ の負の固有値を持つ固有ケットにあることが分かっているとき，$\boldsymbol{S}_2\cdot\hat{\boldsymbol{b}}$ を測定して正の値を得る確率は

$$\cos^2\left[\frac{(\pi-\theta_{ab})}{2}\right]=\sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right) \qquad (3.9.10)$$

で与えられる．その結果

$$P(\hat{\boldsymbol{a}}+;\hat{\boldsymbol{b}}+)=\frac{1}{2}\sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right) \qquad (3.9.11)$$

が得られる．ここで因子1/2は，はじめに $\boldsymbol{S}_1\cdot\hat{\boldsymbol{a}}$ が正の値をとる確率である．(3.9.11)とその一般化を(3.9.9)の他の２項に行ったものを用いて，ベルの不等式を

$$\sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right)\leqq\sin^2\left(\frac{\theta_{ac}}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\theta_{cb}}{2}\right) \qquad (3.9.12)$$

のように書くことができる．

ところで不等式(3.9.12)は幾何学的に見て，常には成り立たないことが示せる．簡単のために $\hat{\boldsymbol{a}}$，$\hat{\boldsymbol{b}}$，$\hat{\boldsymbol{c}}$ を一平面内に選び，$\hat{\boldsymbol{a}}$，$\hat{\boldsymbol{b}}$ で定義される２方向を $\hat{\boldsymbol{c}}$ が等分するとしよう：

$$\theta_{ab}=2\theta, \qquad \theta_{ac}=\theta_{cb}=\theta\,. \qquad (3.9.13)$$

すると不等式(3.9.12)は

$$0<\theta<\frac{\pi}{2} \qquad (3.9.14)$$

に対して破られてしまう．例えば $\theta=\frac{\pi}{4}$ ととると

$$0.500 \leqq 0.292 \qquad ?? \qquad (3.9.15)$$

となる．したがって量子力学的予測は，ベルの不等式と両立しない．量子力学と，アインシュタインの局所原理を満足するこれに代わる理論との差は，実験的に確かめられるという意味で，実際に一つの観測量である．

ベルの不等式を試すために，幾つかの実験が実施された．その中の一つの実験では，低エネルギーの陽子-陽子散乱における散乱後の陽子間のスピン相関が測定された．それ以外の実験ではすべて，励起原子（Ca，Hg，……）のカスケード遷移

$$(J=0) \xrightarrow{\gamma} (J=1) \xrightarrow{\gamma} (J=0) \tag{3.9.16}$$

やポジトロニウム（$e^+ \ e^-$ の $^1S_0$ 束縛状態）の崩壊における，光子対間の光子の偏りの相関が測定された．光子の偏りの相関を調べることは，1.1節で述べた類似性

$$\begin{aligned} S_z+ &\longrightarrow x\text{-方向の } \hat{\epsilon} \\ S_z- &\longrightarrow y\text{-方向の } \hat{\epsilon} \\ S_x+ &\longrightarrow \text{ななめ } 45^\circ \text{ 方向の } \hat{\epsilon} \\ S_x- &\longrightarrow \text{ななめ } 135^\circ \text{ 方向の } \hat{\epsilon} \end{aligned} \tag{3.9.17}$$

から見て，同様に有効である*．

すべての最近の精密な実験結果は，ベルの不等式が破られていることを決定的に確立した．ある実験では標準偏差の9倍以上もずれていた．さらにすべてのこうした実験で不等式の破れ方は，量子力学の予測が誤差の範囲で成り立っていることを示している．この論争で量子力学に勝利の旗が上ったのである．

量子力学的予測が事実確かめられたのではあるが，すべての問題がここで自明なことになったわけではない．実験的に裁断は下ったが，この種の測

* 光子を扱うことは，本書の主題である非相対論的量子力学の領域から逸脱していることを，ここで注意しておきたい．

定の多くの面で，心理的にまだ不安に思えることがある．特に次の点を考えよう．観測者 A が粒子 1 の測定をした直後，粒子 2 は——原理的には粒子 1 から何十光年も離れていてよいのだが——表 3.1 で明らかな著しい相関が実現されるようにスピンを向ける方法を，どのようにして“知る”のであろうか．ベルの不等式を検証する実験の一つ（A．アスペと協力者により実施された）では，A が何を測るかの決定を遅らせ光より遅く伝わるどんな影響も B に至らないようにしてから分析器の配置をすばやく変えていた．[†]

この節の終わりに，このような風変りなことがあるにもかかわらずスピン相関の測定を利用して，巨視的に離れた 2 点間で意味のある情報を通信するのはできないことを示したい．特に超光速（光より速い）通信は不可能である．

A と B があらかじめ打合せして，S_z を測るとする．すると A に聞かないでも B は A が何を得ているかが正確に分かる．しかしこれは，A と B が通信していることにはならない．B はただ一連のランダムな正か負の符号を観測するだけである．明らかに，この中には有用な情報が含まれていない．B が量子力学の予測する著しい相関を確認するのは，A と会ってノート（あるいは計算機の出力紙）を比較してからである．

A と B が通信することは，二人の中一人が急に分析装置の方向を変えればできると思われるかもしれない．はじめ，A は S_z を測り B は S_x を測ることにしていたとしよう．A の測定結果は B の測定結果と全く関連がなく，伝えられる情報はない．だがここで A が突然約束を破り B に黙って S_x を測りはじめたとしよう．すると今度は A の結果と B の結果に完全な相関がある．しかし A が分析器の方向を変えたということを推測する方法が，B にはないのである．B は自分のノートだけから，ただ一連のランダムな正か負の符号を見続ける．ここでも伝えられる情報はない．

† 訳注：A. Aspect *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **49** (1982), 1804. を参照せよ．

3.10 テンソル演算子

ベクトル演算子

我々は$\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{S}$，$\boldsymbol{L}$といったベクトルの記号を用いてきたが，まだその回転の性質を系統的に議論していない．ベクトル演算子であるそれらが，回転するときの性質はどのようであろうか．この節でベクトル演算子の正確な量子力学的定義を与えるが，それは角運動量演算子との交換関係に基づいている．それから一般化して，さらに複雑な変換の性質を持ったテンソル演算子を論じ，ベクトルとテンソル演算子の行列要素に関する重要な定理を導く．

よく知っているように古典物理学の**ベクトル**は3成分を持つ量で，回転の際，定義により$V_i \to \sum_j R_{ij}V_j$のように変換する．量子力学ではベクトル演算子の期待値が，回転の際に古典的ベクトルと同様に変換するものと要請するのが適当であろう．つまり回転の際に状態ケットが

$$|\alpha\rangle \to \mathscr{D}(R)|\alpha\rangle \tag{3.10.1}$$

に従って変化するので，$\boldsymbol{V}$の期待値は次のように変化すると仮定する：

$$\langle\alpha|V_i|\alpha\rangle \to \langle\alpha|\mathscr{D}^\dagger(R)V_i\mathscr{D}(R)|\alpha\rangle = \sum_j R_{ij}\langle\alpha|V_j|\alpha\rangle. \tag{3.10.2}$$

これは任意のケット$|\alpha\rangle$に対して成り立たなければならない．そこで

$$\mathscr{D}^\dagger(R)V_i\mathscr{D}(R) = \sum_j R_{ij}V_j \tag{3.10.3}$$

が**演算子の等式**として成立しなければならない．ここでR_{ij}は回転Rに対応する3×3行列である．

いま特別な場合として，無限小回転を考える．回転が無限小であるとき

$$\mathscr{D}(R) = 1 - \frac{i\varepsilon \boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}}{\hbar} \tag{3.10.4}$$

である．すると(3.10.3)を

$$V_i + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_i, \boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}] = \sum_j R_{ij}(\hat{\boldsymbol{n}};\varepsilon)V_j \tag{3.10.5}$$

と書くことができる．特に $\hat{\boldsymbol{n}}$ が z-軸の方向にあると

$$R(\hat{z};\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.10.6}$$

であるので

$$i=1;\quad V_x + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_x, J_z] = V_x - \varepsilon V_y \tag{3.10.7a}$$

$$i=2;\quad V_y + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_y, J_z] = \varepsilon V_x + V_y \tag{3.10.7b}$$

$$i=3;\quad V_z + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_z, J_z] = V_z \tag{3.10.7c}$$

となる．これは $\boldsymbol{V}$ が交換関係

$$[V_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk}\hbar V_k \tag{3.10.8}$$

を満たさなければならないことを意味している．

有限の回転をしたときの V の振舞いは，明らかにこの交換関係から完全に決まる．よく知っている公式(2.3.47)を

$$\exp\left(\frac{iJ_j\phi}{\hbar}\right)V_i\exp\left(-\frac{iJ_j\phi}{\hbar}\right) \tag{3.10.9}$$

に単に適用すればよい．必要なのはただ

$$\Big[J_j ,\ [J_j ,\ [\cdots [J_j ,\ V_i] \cdots]] \Big] \qquad (3.10.10)$$

を計算することである．幾重もの交換子を計算していくと，スピンの場合(3.2.7)と同様に，V_i か V_k ($k \neq i, j$) に戻る．

(3.10.8)をベクトル演算子の性質を定義する式として使うことができる．角運動量の交換関係は，(3.10.8)で $V_i \to J_i$, $V_k \to J_k$ とした特別の場合であることに注意しよう．他の特別な場合として，$[y, L_z] = i\hbar x$, $[x, L_z] = -i\hbar y$, $[p_x, L_z] = -i\hbar p_y$, $[p_y, L_z] = i\hbar p_x$ がある．これらは直接に確かめることができる．

直交テンソルと既約テンソル

回転が 3×3 直交行列 R で指定されるとき，古典物理ではテンソル $T_{ijk\cdots}$ を，$V_i \to \Sigma_j R_{ij} V_j$ を一般化して

$$T_{ijk\cdots} \to \sum_{i'}\sum_{j'}\sum_{k'} \cdots R_{ii'} R_{jj'} R_{kk'} \cdots T_{i'j'k'\cdots} \qquad (3.10.11)$$

によって定義するのが習慣である．添字の数はテンソルの**階数**と呼ばれる．このようなテンソルは**直交テンソル**として知られている．

階数2の直交テンソルの最も簡単な例は，2つのベクトル $\boldsymbol{U}$ と $\boldsymbol{V}$ から作られた**ダイアディック**である．$\boldsymbol{U}$ の直交軸成分を一つと $\boldsymbol{V}$ の直交軸成分を一つとり，単に組み合わせる：

$$T_{ij} = U_i V_j . \qquad (3.10.12)$$

全部で9個の成分があることに注意しよう．これらは回転の際，明らかに(3.10.11)のように変換する．

(3.10.12)のような直交テンソルの持つ難点は，これが可約であること――すなわち，これが回転の際，異なる変換をする部分に分解できることである．特に(3.10.12)のダイアディックは

$$U_i V_j = \frac{\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{V}}{3}\delta_{ij} + \frac{(U_i V_j - U_j V_i)}{2} + \left(\frac{U_i V_j + U_j V_i}{2} - \frac{\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{V}}{3}\delta_{ij}\right) \qquad (3.10.13)$$

と表わされる．右辺第一項 $\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{V}$ は，回転の際に不変なスカラー積である．第2項はベクトル積 $\varepsilon_{ijk}(\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_k$ として書ける，反対称テンソルである．これは全部で3個の独立成分を持つ．最後は5個（＝6－1個，1はトレイスレスの条件に由来）の独立成分を持つ，3×3対称トレイスレス・テンソルである．独立成分の個数は

$$3\times3=1+3+5 \tag{3.10.14}$$

のように一致している．ここで気付くのは(3.10.14)の右辺に現われる数はそれぞれ正確に，角運動量を $l=0$，$l=1$，$l=2$ とするものの多重度であることである．これはダイアディックが，$l=0,1,2$ の球面調和関数のように変換できるテンソルに分解されたことを示唆している．事実(3.10.13)は直交テンソルが既約**球面テンソル**に還元されることを示す最も簡単な例である．

球面テンソルの正確な定義を提示する前に，はじめに階数 k の球面テンソルの例を与えよう．球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\phi)$ を考える．すでに見たように，これを $Y_l^m(\hat{\boldsymbol{n}})$ と書くこともできる．$\hat{\boldsymbol{n}}$ の方向は，θと ϕ で表わされる．ここで $\hat{\boldsymbol{n}}$ をあるベクトル $\boldsymbol{V}$ で置き換える．この結果，磁気量子数 q（m の代わりに）を持つ階数 k（l の代わりに）の球面テンソル

$$T_q^{(k)}=Y_{l=k}^{m=q}(\boldsymbol{V}) \tag{3.10.15}$$

が得られる．特に $k=1$ の場合は，$l=1$ の球面調和関数を用い $(z/r)=(\hat{\boldsymbol{n}})_z$ を V_z で置き換えるなどして

$$\begin{aligned} Y_1^0&=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{z}{r}\ \rightarrow\ T_0^{(1)}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,V_z,\\ Y_1^{\pm1}&=\mp\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x\pm iy}{\sqrt{2}\,r}\ \rightarrow\ T_{\pm1}^{(1)}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\mp\frac{V_x\pm iV_y}{\sqrt{2}}\right) \end{aligned} \tag{3.10.16}$$

が得られる．明らかにこれは高次の k に一般化でき，例えば

$$Y_2^{\pm2}=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\frac{(x\pm iy)^2}{r^2}\ \rightarrow\ T_{\pm2}^{(2)}=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}(V_x\pm iV_y)^2 \tag{3.10.17}$$

となる．Y_l^m が既約であるように $T_q^{(k)}$ も既約である．このため球面テンソルを扱う方が，直交テンソルを扱うよりずっと都合がよい．

このようにして構成した球面テンソルの変換の様子を見るために，はじめに Y_l^m が回転の際どのように変換するか検討しておこう．まず方向の固有ケットに対し

$$|\hat{\boldsymbol{n}}> \to \mathscr{D}(R)|\hat{\boldsymbol{n}}> \equiv |\hat{\boldsymbol{n}}'> \tag{3.10.18}$$

により，回転を受けた固有ケット $|\hat{\boldsymbol{n}}'>$ を定義する．そして $Y_l^m(\hat{\boldsymbol{n}}') = <\hat{\boldsymbol{n}}'|l, m>$ が，$Y_l^m(\hat{\boldsymbol{n}})$ を用いてどのように書けるか調べたい．それは簡単である．次式

$$\mathscr{D}(R^{-1})|l, m> = \sum_{m'}|l, m'> \mathscr{D}_{m'm}^{(l)}(R^{-1}) \tag{3.10.19}$$

より出発し，左から $<\hat{\boldsymbol{n}}|$ をかけ，(3.10.18)を用いる：

$$Y_l^m(\hat{\boldsymbol{n}}') = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\hat{\boldsymbol{n}})\mathscr{D}_{m'm}^{(l)}(R^{-1}). \tag{3.10.20}$$

もし $Y_l^m(\boldsymbol{V})$ のように振舞う演算子があるならば

$$\mathscr{D}^\dagger(R)\, Y_l^m(\boldsymbol{V})\mathscr{D}(R) = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\boldsymbol{V})\mathscr{D}_{m'm}^{(l)*}(R) \tag{3.10.21}$$

が成り立つと期待するのがもっともであろう．ここで $\mathscr{D}_{m'm}^{(l)}(R^{-1})$ を書き変えるために，回転演算子のユニタリー性（3.5.47）を用いた．

これまでのことはすべて球面テンソルの定義を誘導するものであった．ここで量子力学で用いる球面テンソルを考えよう．(3.10.21)にならって階数 k で（$2k+1$）成分を持つ球面テンソル演算子を

$$\mathscr{D}^\dagger(R)\, T_q^{(k)}\mathscr{D}(R) = \sum_{q'=-k}^{k} \mathscr{D}_{qq'}^{(k)*}(R)\, T_{q'}^{(k)}, \tag{3.10.22a}$$

と，または同じことであるが次式を満たす演算子として定義する：

$$\mathscr{D}(R)\, T_q^{(k)}\, \mathscr{D}^\dagger(R) = \sum_{q'=-k}^{k} \mathscr{D}_{q'q}^{(k)}(R)\, T_{q'}^{(k)}. \qquad (3.10.22\text{b})$$

この定義は $T_q^{(k)}$ が $Y_{l=k}^{m=q}(\boldsymbol{V})$ のように書かれるかどうかに拘らず，成立する．例えば，$(U_x+iU_y)(V_x+iV_y)$ は，$(V_x+iV_y)^2$ と違って $Y_k^q(\boldsymbol{V})$ とは表わせないが，階数 2 の球面テンソルの $q=+2$ 成分である．

球面テンソルのもっと便利な定義は，(3.10.22a)の無限小回転の形，すなわち

$$\left(1+\frac{i\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\varepsilon}{\hbar}\right) T_q^{(k)} \left(1-\frac{i\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\varepsilon}{\hbar}\right)$$

$$= \sum_{q'=-k}^{k} T_{q'}^{(k)} < kq' | 1+\frac{i\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\varepsilon}{\hbar} | kq > \qquad (3.10.23)$$

または

$$\left[\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}},\, T_q^{(k)}\right] = \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} < kq' | \boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}} | kq > \qquad (3.10.24)$$

を考えると得られる．$\hat{\boldsymbol{n}}$ を z-方向にとったり，$(\hat{\boldsymbol{x}}\pm i\hat{\boldsymbol{y}})$ 方向にとったりして，また J_z や $J_\pm$ のゼロにならない行列要素[(3.5.35b)および(3.5.41)を見よ]を用いることにより

$$\left[J_z,\, T_q^{(k)}\right] = \hbar q T_q^{(k)} \qquad (3.10.25\text{a})$$

および

$$\left[J_\pm,\, T_q^{(k)}\right] = \hbar\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}\, T_{q\pm 1}^{(k)} \qquad (3.10.25\text{b})$$

が得られる．これらの交換関係は，(3.10.22)に代わる球面テンソルの定義と考えることができる．

テンソル積

直交テンソルの表示を用いて，二つのベクトルからスカラー，ベクトル（または反対称テンソル）およびトレイスレス対称テンソルをどのように作るかを学んだ．もちろん，球面テンソルの表示でこれらを書くこともできる（Baym 1969，17章）．例えば

$$T_0^{(0)} = \frac{-\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{V}}{3} = \frac{U_{+1}V_{-1} + U_{-1}V_{+1} - U_0V_0}{3},$$

$$T_q^{(1)} = \frac{(\boldsymbol{U}\times\boldsymbol{V})_q}{i\sqrt{2}},$$

$$T_{\pm2}^{(2)} = U_{\pm1}V_{\pm1}, \tag{3.10.26}$$

$$T_{\pm1}^{(2)} = \frac{U_{\pm1}V_0 + U_0V_{\pm1}}{\sqrt{2}},$$

$$T_0^{(2)} = \frac{U_{+1}V_{-1} + 2U_0V_0 + U_{-1}V_{+1}}{\sqrt{6}}$$

のようにである．ここで $U_q(V_q)$ は，ベクトル $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{V})$ に対応する階数１の球面テンソルの q 番目の成分である．前に述べた変換の性質は，Y_l^m と比較する際に $U_{+1} = -(U_x + \mathrm{i}U_y)/\sqrt{2}$，$U_{-1} = (U_x - iU_y)/\sqrt{2}$，$U_0 = U_z$ を思い出せば確かめられる．$V_{\pm1,0}$ に対しても同様に確かめられる．階級２では例えば

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{3z^2 - r^2}{r^2},$$

において，$3z^2 - r^2$ は

$$2z^2 + 2\left[-\frac{(x+iy)}{\sqrt{2}}\frac{(x-iy)}{\sqrt{2}}\right]$$

と書けるから，Y_2^0 は $T_0^{(2)}$ の特別な場合で，$\boldsymbol{U} = \boldsymbol{V} = \hat{\boldsymbol{r}}$ と置いたものである．

テンソル積をもっと系統的に作る方法は次のようである．一つの定理を述べることから始めよう：

定理　$X_{q_1}^{(k_1)}$，$Z_{q_2}^{(k_2)}$をそれぞれ階数k_1，k_2の既約球面テンソルであるとしよう．すると

$$T_q^{(k)} = \sum_{q_1}\sum_{q_2} < k_1 k_2 ; q_1 q_2 | k_1 k_2 ; kq > X_{q_1}^{(k_1)} Z_{q_2}^{(k_2)} \tag{3.10.27}$$

は階数kの球面（既約）テンソルである．

証明　$T_q^{(k)}$が回転の際(3.10.22)に従って変換することを示さなければならない：

$$\mathscr{D}^\dagger(R) T_q^{(k)} \mathscr{D}(R) = \sum_{q_1}\sum_{q_2} < k_1 k_2 ; q_1 q_2 | k_1 k_2 ; kq >$$

$$\times \mathscr{D}^\dagger(R) X_{q_1}^{(k_1)} \mathscr{D}(R) \mathscr{D}^\dagger(R) Z_{q_2}^{(k_2)} \mathscr{D}(R)$$

$$= \sum_{q_1}\sum_{q_2}\sum_{q_1'}\sum_{q_2'} < k_1 k_2 ; q_1 q_2 \mid k_1 k_2 ; kq >$$

$$\times X_{q_1'}^{(k_1)} \mathscr{D}_{q_1' q_1}^{(k_1)}(R^{-1}) Z_{q_2'}^{(k_2)} \mathscr{D}_{q_2' q_2}^{(k_2)}(R^{-1})$$

$$= \sum_{k''}\sum_{q_1}\sum_{q_2}\sum_{q_1'}\sum_{q_2'}\sum_{q''}\sum_{q'} < k_1 k_2 ; q_1 q_2 | k_1 k_2 ; kq >$$

$$\times < k_1 k_2 ; q_1' q_2' | k_1 k_2 ; k'' q' >$$

$$\times < k_1 k_2 ; q_1 q_2 | k_1 k_2 ; k'' q'' > \mathscr{D}_{q' q''}^{(k'')}(R^{-1}) X_{q_1'}^{(k_1)} Z_{q_2'}^{k_2} .$$

ここでクレプシュ・ゴルダン級数の公式(3.7.69)を用いた．クレプシュ・ゴルダン係数の直交性，(3.7.41)を用いると上の式は

$$\sum_{k''}\sum_{q_1'}\sum_{q_2'}\sum_{q''}\sum_{q'} \delta_{k k''} \delta_{q q''} < k_1 k_2 ; q_1' q_2' \mid k_1 k_2 ; k'' q' >$$

$$\times \mathscr{D}_{q' q''}^{(k'')}(R^{-1}) X_{q_1'}^{(k_2)} Z_{q_2'}^{(k_2)}$$

となる．最後にこの表式は

$$\sum_{q'}\left(\sum_{q_1'}\sum_{q_2'} < k_1k_2\,;\,q_1'q_2' \,|\, k_1k_2\,;\,kq' > X_{q_1'}^{(k_1)}Z_{q_2'}^{(k_2)}\right)\mathscr{D}_{q'q}^{(k)}(R^{-1})$$

$$=\sum_{q'}T_{q'}^{(k)}\mathscr{D}_{q'q}^{(k)}(R^{-1})=\sum_{q'}\mathscr{D}_{qq'}^{(k)*}(R)T_{q'}^{(k)}$$

と書き変えられる． □

以上は，二つのテンソル演算子をかけて階数の高い（あるいは低い）テンソル演算子をどのように作ったらよいかを示している．その際，二つのテンソルからテンソル積を作りあげる仕方は，二つの角運動量をたし合わせて一つの角運動量固有状態を作りあげる仕方と，完全に類似している．もし $k_{1,2} \to j_{1,2}$，$q_{1,2} \to m_{1,2}$ とすれば，現われる係数はクレプシュ・ゴルダン係数と厳密に等しい．

テンソル演算子の行列要素：ウィグナー・エッカルトの定理

原子や原子核と電磁波との相互作用を考慮する際に，テンソル演算子の行列要素の値を角運動量固有状態に関して求めることが，しばしば必要である．この例は第5章で与えられる．一般にそのような行列要素を計算するのは，手ごわい仕事である．しかし，これらの行列要素には，純粋に運動学的あるいは幾何学的考察によって決まるある性質が存在する．これを今から議論する．

第1に，非常に簡単な m-選択則がある：

m-選択則

$$<\alpha', j'm' \,|\, T_q^{(k)} | \alpha, j\,m> = 0, \qquad m' \neq q + m\,. \tag{3.10.28}$$

証明　(3.10.25a)を用いると

$$<\alpha', j'm' | [J_z, T_q^{(k)}] - \hbar q T_q^{(k)} | \alpha, jm>$$

$$= \left[\,(m'-m)\hbar - \hbar q\,\right] <\alpha', j'm' \,|\, T_q^{(k)} | \alpha, jm> = 0$$

であるから，$m'=q+m$ でなければ

$$<\alpha', j'm'|T_q^{(k)}|\alpha, jm> = 0$$

となる．□

この規則を別の方法で導くには，回転の際の $T_q^{(k)}|\alpha, jm>$ の変換の性質に注目すればよい．すなわち

$$\mathscr{D}\, T_q^{(k)}|\alpha, jm> = \mathscr{D}\, T_q^{(k)}\mathscr{D}^\dagger\mathscr{D}|\alpha, jm> \qquad (3.10.29)$$

で，$\mathscr{D}$ が z-軸のまわりの回転演算子を表わすと，(3.10.22b)と(3.1.16)を用いて

$$\mathscr{D}(\hat{z}, \phi)T_q^{(k)}|\alpha, jm> = e^{-iq\phi}e^{-im\phi}T_q^{(k)}|\alpha, jm> \qquad (3.10.30)$$

となる．これは $|\alpha', j'm'>$ と $q+m=m'$ の場合を除いて直交する．

ここで量子力学で最も重要な定理の一つである，ウィグナー・エッカルトの定理を導くことにしよう．

ウィグナー・エッカルトの定理

テンソル演算子の角運動量の固有状態に関する行列要素は

$$<\alpha', j'm'|T_q^{(k)}|\alpha, jm> = <jk; mq|jk; j'm'>\frac{<\alpha'j'\|T^{(k)}\|\alpha j>}{\sqrt{2j+1}}$$

(3.10.31)

を満足する．ここで**二重線の行列要素**は m や m'，q によらない．

この定理の証明を示す前に，定理のもつ意味を見てみよう．第一に行列要素が二つの因子の積として書かれていることが分かる．はじめの因子は j

と k を加えて j' とする，クレプシュ・ゴルダン係数である．これは系が z-軸に対してどの方向にあるかという，幾何学的関係のみによる．テンソル演算子の固有の性質には全く関係しない．第2の因子はダイナミックスに依存する．例えば α は動径量子数を表わしていてもよく，それを計算するのに例えば動径積分が含まれてもよい．一方それは，物理系の方向を指定する磁気量子数，m, m' および q から完全に独立している．様々な m，m'，q の組み合わせを持つ $\langle\alpha', j'm'|T_q^{(k)}|\alpha, jm\rangle$ の値を求めるためには，その中の一つだけ分かれば十分である．他はすべて，既知であるクレプシュ・ゴルダン係数に比例しているので，幾何学的に関係づけられる．共通の比例因子は $\langle\alpha' j'\|T^{(k)}\|\alpha j\rangle$ である．これは幾何学的特徴に全く関係していない．

テンソル演算子の行列要素に対する選択則は，角運動量の合成に対する選択則から直ちに読みとれる．実際，クレプシュ・ゴルダン係数がゼロでないという要請から，先に導いた m-選択則(3.10.28)と，三角関係式

$$|j-k| \leq j' \leq j+k \tag{3.10.32}$$

が二つとも直ちに得られる．ここではじめの定理を証明する．

証明　(3.10.25b)を用いると

$$\langle\alpha', j'm'|[J_\pm, T_q^{(k)}]|\alpha, jm\rangle = \hbar\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}$$
$$\times\langle\alpha', j'm'|T_{q\pm1}^{(k)}|\alpha, jm\rangle \tag{3.10.33}$$

であるが，さらに(3.5.39)と(3.5.40)を用いると

$$\sqrt{(j'\pm m')(j'\mp m'+1)}\langle\alpha', j', m'\mp 1|T_q^{(k)}|\alpha, jm\rangle$$
$$=\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\langle\alpha', j'm'|T_q^{(k)}|\alpha, j, m\pm 1\rangle$$
$$+\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}\langle\alpha', j'm'|T_{q\pm1}^{(k)}|\alpha, jm\rangle \tag{3.10.34}$$

となる．これをクレプシュ・ゴルダン係数の漸化式(3.7.49)と比較しよう．j'

$\to j$, $m' \to m$, $j \to j_1$, $m \to m_1$, $k \to j_2$, そして $q \to m_2$ の入れ替えをすると，両者が驚くほど似ていることに気づく．二つの漸化式は $\sum_j a_{ij} x_j = 0$ の形をしている．すなわち，係数 a_{ij} が等しい1階線形同次方程式である．さて

$$\sum_j a_{ij} x_j = 0, \qquad \sum_j a_{ij} y_j = 0 \tag{3.10.35}$$

のときは常に x_j（または y_j）を個々独立に解くことができず，それらの比が解として求まる．したがって c を共通因子として

$$\frac{x_j}{x_k} = \frac{y_j}{y_k} \quad \text{または} \quad x_j = c y_j \tag{3.10.36}$$

となる．クレプシュ・ゴルダンの漸化式(3.7.49)中の $<j_1 j_2 ; m_1, m_2 \pm 1 | j_1 j_2 ; jm>$ が(3.10.34)中の $<\alpha', j'm' | T^{(k)}_{q\pm1} | \alpha, jm>$ に対応することに注目すると

$$<\alpha', j'm' | T^{(k)}_{q\pm1} | \alpha, jm>$$

$$= (m, q, m' \text{に独立な共通比例定数}) <jk ; m, q \pm 1 | jk ; j'm'> \tag{3.10.37}$$

が分かる．これで定理が証明された． □

ウィグナー・エッカルトの定理のやさしい例を二つあげよう．

例1． 階数0のテンソル，すなわち，スカラー $T^{(0)}_0 = S$．

スカラー演算子の行列要素は

$$<\alpha', j'm' | S | \alpha, jm> = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \frac{\langle \alpha' j' \| S \| \alpha j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \tag{3.10.38}$$

を満足する．S を $|\alpha, jm>$ に作用させることは，角運動量ゼロを加えることに似ている．スカラー演算子は j や m の値を変えることができない．

例2． ベクトル演算子．これは球面テンソルの言葉でいえば，階数1のテンソルである． $\boldsymbol{V}$ の球面成分は $V_{q=\pm1,0}$ と書かれるので，選択則

$$\Delta m \equiv m' - m = \pm 1,\ 0,$$

$$\Delta j \equiv j' - j = \begin{cases} \pm 1 \\ 0 \end{cases}. \tag{3.10.39}$$

が成り立つ．さらにまた，0 → 0の遷移は禁止される．この選択則は輻射の理論において基本的であり重要である．これは放出される光子の長波長極限で得られる，双極子選択則である*.

$j = j'$の場合ウィグナー・エッカルトの定理は――ベクトル演算子に適用すると――特に簡単な形をとる．明らかな理由からこれは，しばしば**射影定理**と呼ばれている．

射影定理

$$\langle \alpha', jm' | V_q | \alpha, jm \rangle = \frac{\langle \alpha', jm | \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{V} | \alpha, jm \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle jm' | J_q | jm \rangle. \tag{3.10.40}$$

ここで(3.10.26)の後にある議論と同じように

$$J_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(J_x \pm iJ_y) = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} J_\pm\ ,\ \ J_0 = J_z \tag{3.10.41}$$

と選んだ．

証明　(3.10.26)に注意すると，ウィグナー・エッカルトの定理(3.10.31)により

$$\langle \alpha', jm | \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{V} | \alpha, jm \rangle = \langle \alpha', jm | J_0 V_0 - J_{+1} V_{-1} - J_{-1} V_{+1} | \alpha, jm \rangle$$

$$= m\hbar \langle \alpha', jm | V_0 | \alpha, jm \rangle + \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \langle \alpha', j, m-1 | V_{-1} | \alpha,\ jm \rangle$$

* 付加的なパリティー選択則を第4章2節で議論する，これらにより，$E1$双極子選択則が導かれる．

$$-\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\langle\alpha', j, m+1|V_{+1}|\alpha,\ jm\rangle$$

$$=c_{jm}\langle\alpha' j\|\boldsymbol{V}\|\alpha j\rangle \tag{3.10.42}$$

となる．ここで c_{jm} は α, α' および $\boldsymbol{V}$ に依存せず，$V_{0,\pm1}$ の行列要素はすべて二重線の行列要素［**換算(縮小)行列の要素**と呼ばれることもある．］に比例する．さらに c_{jm} は，$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}$ がスカラー演算子であるので m に依らないから，これを c_j と書いてもよい．c_j が $\boldsymbol{V}$ に依らないので(3.10.42)は $\boldsymbol{V}\to\boldsymbol{J}$，$\alpha'\to\alpha$ としても成立する．すなわち

$$\langle\alpha,\ jm|\boldsymbol{J}^2|\alpha,\ jm\rangle=c_j\langle\alpha j\|\boldsymbol{J}\|\alpha j\rangle \tag{3.10.43}$$

である．ウィグナー・エッカルトの定理を，V_q と J_q に適用すると

$$\frac{\langle\alpha',\ jm'|V_q|\alpha,\ jm\rangle}{\langle\alpha,\ jm'|J_q|\alpha,\ jm\rangle}=\frac{\langle\alpha' j\|\boldsymbol{V}\|\alpha j\rangle}{\langle\alpha j\|\boldsymbol{J}\|\alpha j\rangle} \tag{3.10.44}$$

となる．しかし(3.10.44)の右辺は，(3.10.42)と(3.10.43)により $\langle\alpha',\ jm|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}|\alpha,\ jm\rangle/\langle\alpha,\ jm|\boldsymbol{J}^2|\alpha,\ jm\rangle$ と等しい．さらに(3.10.43)の左辺は $j(j+1)\hbar^2$ にほかならない．それゆえ

$$\langle\alpha', jm'|V_q|\alpha, jm\rangle=\frac{\langle\alpha', jm|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}|\alpha, jm\rangle}{\hbar^2 j(j+1)}\langle jm'|J_q|jm\rangle \tag{3.10.45}$$

が得られ，射影定理は証明された． □

この定理の応用はあとの節で扱う．

問 題

1．$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$の固有値と固有ベクトルを求めよ．

1個の電子が$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$のスピン状態にあるとせよ．$s_y$を測定したとき，結果が$\hbar/2$である確率はいくらか．

2．a_0を実数，$\boldsymbol{a}$を実数を成分とする3次元ベクトルとするとき

$$U = \frac{a_0 + i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}}{a_0 - i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}}$$

で定義される2×2行列を考える．

a．Uがユニタリーかつユニモジュラーであることを証明せよ．

b．一般に2×2ユニタリー・ユニモジュラー行列は，3次元での回転を表わす．Uに対応する回転軸と回転角を，a_0，a_1，a_2およびa_3を用いて求めよ．

3．z-方向に一様な磁場があるときの，電子・陽電子系のスピンに依存するハミルトニアンは

$$H = A\boldsymbol{S}^{(e-)}\cdot\boldsymbol{S}^{(e+)} + \left(\frac{eB}{mc}\right)(S_z^{(e-)} - S_z^{(e+)})$$

と書ける．この系のスピン関数は$\chi_+^{(e-)}\chi_-^{(e+)}$で与えられるとする．

a．この関数は，$A\to 0$，$eB/mc \neq 0$の極限でHの固有関数であるか．もしそうならば，エネルギー固有値を求めよ．もしそうでなければ，Hの期待値を求めよ．

b．同じ問題を$eB/mc\to 0$，$A\neq 0$の極限で考えよ．

4．スピン１の粒子を考える．

$$S_z(S_z+\hbar)(S_z-\hbar) \quad \text{および} \quad S_x(S_x+\hbar)(S_x-\hbar)$$

の行列要素を計算せよ．

5．剛体のハミルトニアンを

$$H=\frac{1}{2}\left(\frac{K_1{}^2}{I_1}+\frac{K_2{}^2}{I_2}+\frac{K_3{}^2}{I_3}\right)$$

とする．ここで $\boldsymbol{K}$ は剛体座標系での角運動量である．この表式より $\boldsymbol{K}$ に対するハイゼンベルクの運動方程式を求め，対応極限でオイラーの運動方程式を見出せ．

6．（α，β，γ）をオイラー角として，$U=e^{iG_3\alpha}e^{iG_2\beta}e^{iG_3\gamma}$ と置く．U が回転（α，β，γ）を表わすために，G_k の満足する交換関係は何か．$\boldsymbol{G}$ を角運動量の演算子と比較せよ．

7．$\boldsymbol{A}$ の３成分が行列であるとき次の等式

$$U^{-1}A_kU=\sum R_{kl}A_l$$

の意味は何か．この等式より，行列要素 $\langle m|A_k|n\rangle$ が，ベクトルのように変換することを示せ．

8．次式で表わされる一連のオイラー回転を考える：

$$\mathscr{D}^{(1/2)}(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=\exp\left(\frac{-i\sigma_3\alpha}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\sigma_2\beta}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\sigma_3\gamma}{2}\right)$$

$$=\begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos\frac{\beta}{2} & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2}\sin\frac{\beta}{2} & e^{i(\alpha+\gamma)/2}\cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}.$$

回転が群の性質を持つことから，この一連の操作はある軸の回りの，角度

θ だけの単一の回転と同値であることが期待される．角度 θ を求めよ．

9．a．スピン1/2の同一粒子からなる系の，純粋アンサンブルを考える．$\langle S_x \rangle$ と $\langle S_z \rangle$ の期待値，および $\langle S_y \rangle$ の符号が分かっているとしよう．状態ベクトルをどのように決めたらよいか示せ．$\langle S_y \rangle$ の大きさを知る必要がないのはなぜか．

b．スピン1/2の系の混合アンサンブルを考える．アンサンブル平均，$[S_x]$，$[S_y]$，$[S_z]$ はすべて分かっているとする．このアンサンブルを記述する 2×2 密度行列を，どのように作ったらよいか示せ．

10．a．密度演算子 ρ の時間的発展は，（シュレーディンガー表示で）

$$\rho(t)=\mathcal{U}(t,\ t_0)\,\rho\,(t_0)\,\mathcal{U}^{\dagger}(t,\ t_0)$$

で与えられることを証明せよ．

b．$t=0$ で純粋アンサンブルがあったとする．時間的発展がシュレーディンガー方程式に従う限り，これは混合アンサンブルに変ることがないことを証明せよ．

11．スピン1の系の集まりを考える．このとき密度行列は 3×3 行列である．この密度行列を特徴づけるのに，独立な（実数の）パラメータは幾つ必要か．アンサンブルを完全に表わすのに，$[S_x]$，$[S_y]$，$[S_z]$ 以外に何を知る必要があるか．

12．角運動量の固有状態 $|j,\ m=m_{\max}=j\rangle$ が，y-軸のまわりに無限小角 ε だけ，回転させられた．回転を受けた新しい状態が，元の状態に見出される確率を与える表式を，関数 $d^{(j)}_{m'm}$ の具体的な形を用いずに，ε^2 のオーダーまで求めよ．

13．j および k を行と列の添字として，行列要素が

$$(G_i)_{jk}=-i\hbar\,\varepsilon_{ijk}$$

で与えられる 3×3 行列 $G_i (i=1, 2, 3)$ は，角運動量の交換関係を満足することを示せ．J_3を対角型にする角運動量演算子 J_i の通常の 3×3 行列に，G_i を 結びつける変換行列の物理的（または幾何学的）意味は何か．得られた結果を無限小回転の下での

$$\boldsymbol{V} \rightarrow \boldsymbol{V} + \hat{\boldsymbol{n}}\delta\phi \times \boldsymbol{V}$$

と関係づけよ．（注：この問題は光子のスピンを理解する上で，助けになるであろう．）

14. a．$\boldsymbol{J}$ を角運動量とする．（$\boldsymbol{J}$ は軌道の $\boldsymbol{L}$，スピンの $\boldsymbol{S}$，あるいは $\boldsymbol{J}_{全体}$のいずれを表わしているとしてもよい．）J_x，J_y，J_z （$J_\pm \equiv J_x \pm iJ_y$）が通常の角運動量の交換関係を満足することを用いて

$$\boldsymbol{J}^2 = J_z^2 + J_+J_- - \hbar J_z$$

を証明せよ．

b．(a)（あるいは他の結果）を用いて

$$J_-\,\psi_{j,\,m} = c_-\,\psi_{j,\,m-1}$$

に現われる係数 c_- に対する，“有名な” 表式を導け．

15. 球対称ポテンシャル $V(r)$ の中にある粒子の波動関数が

$$\psi(\boldsymbol{x}) = (x + y + 3z)f(r)$$

で与えられている．

a．ψ は $\boldsymbol{L}^2$ の固有関数であるか．そうならば l の値はいくらか．もしそうでないならば，$\boldsymbol{L}^2$ を測定したとき得られる可能な l の値をあげよ．

b．粒子が様々な m_l の状態に見出される確率はいくらか．

c．$\psi(\boldsymbol{x})$が固有値 E のエネルギー固有関数であることが分かったとする．

ポテンシャル $V(r)$ をどのようにして見出せるか述べよ.

16. 球対称ポテンシャル中の1粒子が, $\boldsymbol{L}^2$ と L_z の固有状態にあるとする. それぞれ固有値は $\hbar^2 l(l+1)$ と $m\hbar$ である. 状態 $|jm\rangle$ に関する期待値は

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0\,,$$

$$\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \frac{l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2}{2}$$

であることを示せ. この結果を半古典論的に解釈せよ.

17. 半整数の l の値, 例えば $\frac{1}{2}$ が, 軌道角運動量に許されたとする. いつものように

$$L_+ Y_{1/2,\,1/2}(\theta,\ \phi) = 0$$

から

$$Y_{1/2,\,1/2}(\theta,\ \phi) \propto e^{i\phi/2}\sqrt{\sin\theta}$$

が推論できる. 次に $Y_{1/2,\,-1/2}(\theta,\ \phi)$ を作るために, (a) $Y_{1/2,\,1/2}(\theta,\ \phi)$ に L_- を作用させる, (b) $L_- Y_{1/2,\,-1/2}(\theta,\ \phi) = 0$ を用いる, ことを試みよ. この二つの手続きは互いに矛盾する結果を導くことを示せ.（これは軌道角運動量に半整数値は取れないという論証を与える.）

18. 軌道角運動量固有状態 $|l=2,\ m=0\rangle$ を考える. この状態を y-軸のまわりに角度 β だけ回転させたとする. 新しい状態が $m=0$, ±1, ±2 に見出される確率を求めよ.（$l=0$, 1, 2 に対する球面調和関数は付録Aに与えられているが, この問題に有用であろう.）

19. 角運動量を表わすシュウインガーのモデルで, 演算子

$$K_+ \equiv a_+^\dagger a_-^\dagger \quad \text{および} \quad K_- \equiv a_+ a_-$$

の物理的意味は何か．$K_\pm$ の行列要素で，ゼロでないものをあげよ．

20. 角運動量 $j_1=1$ と $j_2=1$ を加えて $j=2,\ 1$ および 0 の状態を作る．はしご演算子の方法か漸化式を用いて，すべて（9個）の $|j,m\rangle$ 固有ケットを $|j_1j_2;m_1m_2\rangle$ により表わせ．答を

$$|j=1,\ m=1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|+,\ 0\rangle-\frac{1}{\sqrt{2}}|0,\ +\rangle,\ \cdots\cdots$$

のように書け．ここで＋と 0 はそれぞれ $m_{1,2}=1,\ 0$ を表わしている．

21. a．任意の j（整数または半整数）に対し

$$\sum_{m=-j}^{j}|d_{mm'}^{(j)}(\beta)|^2m$$

を計算せよ．答を $j=\frac{1}{2}$ の場合に確かめよ．

b．任意の j に対して

$$\sum_{m=-j}^{j}m^2|d_{m'm}^{(j)}(\beta)|^2=\frac{1}{2}j(j+1)\sin^2\beta+m'^2\frac{1}{2}(3\cos^2\beta-1)$$

を証明せよ．[ヒント：これはいろいろな方法で証明できる．例えば J_z^2 の回転の性質を，球面（既約）テンソルを用いて調べてもよい．]

22. a．$j=1$ の系を考える．

$$\langle j=1,\ m'|J_y|j=1,\ m\rangle$$

を 3 × 3 行列の形に具体的に表わせ．

b．$j=1$ に対してのみ，$e^{-iJ_y\beta/\hbar}$ を

$$1-i\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)\sin\beta-\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2(1-\cos\beta)$$

で置き換えることが許されることを示せ.

c．(b)を用い

$$d^{(j=1)}(\beta)=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}(1+\cos\beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \frac{1}{2}(1-\cos\beta)\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \cos\beta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta\\ \frac{1}{2}(1-\cos\beta) & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta & \frac{1}{2}(1+\cos\beta)\end{pmatrix}$$

を示せ.

23. 行列要素 $\langle\alpha_2\beta_2\gamma_2|J_3^2|\alpha_1\beta_1\gamma_1\rangle$ を

$$\mathscr{D}^j_{mn}(\alpha\,\beta\,\gamma)=\langle\alpha\,\beta\,\gamma|j\;m\;n\rangle$$

の級数によって表わせ.

24. スピン $\frac{1}{2}$ の２粒子からなる系を考える．観測者Ａはもっぱら一方の粒子のスピン成分（S_{1z}, S_{1x} など）を測定し，観測者Ｂはもっぱら他方の粒子のスピン成分を測定する．この系はスピン一重項，（すなわち $S_{全体}=0$）の状態にあることが分かっていたとする.

a．観測者Ｂが何も観測しないとき，観測者Ａが $S_{1z}=\hbar/2$ を得る確率はいくらか．同じ問題を $S_{1x}=\hbar/2$ の場合に考えよ.

b．観測者Ｂが粒子２のスピンを $S_{2z}=\hbar/2$ であると確定した．(i) Ａが S_{1z} を測定するとき，(ii) Ａが S_{1x} を測定するとき，観測者Ａの測定結果について何が結論できるか．得られた答が正しいことを説明せよ.

25. 階数１の球面テンソル（すなわちベクトル）

$$V^{(1)}_{\pm1}=\mp\frac{V_x\pm iV_y}{\sqrt{2}}\,,\quad V^{(1)}_0=V_z$$

を考える．問題22で与えた $d^{(j=1)}$ の表式を用いて

$$\sum_{q'} d^{(1)}_{qq'}(\beta) V_{q'}^{(1)}$$

を計算せよ．その答は，y-軸のまわりで回転したときの $V_{x,y,z}$ の変換の性質から期待されるものと一致することを示せ．

26. a．2個の異なるベクトル $\boldsymbol{U}=(U_x,\ U_y,\ U_z)$ と $\boldsymbol{V}=(V_x,\ V_y,\ V_z)$ から，階数1の球面テンソルを作れ．$U_{x,y,z}$ および $V_{x,y,z}$ を用い，具体的に $T^{(1)}{}_{\pm1,0}$ を表わせ．

 b．2個の異なるベクトル $\boldsymbol{U}$，$\boldsymbol{V}$ から，階数2の球面テンソルを作れ．$U_{x,y,z}$ および $V_{x,y,z}$ を用い，具体的に $T^{(2)}_{\pm2,\pm1,0}$ を表わせ．

27. 中心力ポテンシャルによってある定まった中心に束縛された，スピンをもたない粒子を考える．

 a．行列要素
 $\langle n',\ l',\ m'|\mp\frac{1}{\sqrt{2}}(x\pm iy)|n,\ l,\ m\rangle$ と $\langle n',\ l',\ m'|z|n,\ l,\ m\rangle$ をウィグナー・エッカルトの定理のみを用いて，できるだけ関係づけよ．どのような条件のとき行列要素がゼロにならないかを確かめよ．

 b．同じ問題を，波動関数 $\psi(\boldsymbol{x})=R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\ \phi)$ を用いて検討せよ．

28. a．階数2の球面(既約)テンソルの成分として，xy，xz および (x^2-y^2) を表わせ．

 b．期待値

$$Q\equiv e\langle\alpha,\ j,\ m=j|(3z^2-r^2)|\alpha,\ j,\ m=j\rangle$$

 は，4重極モーメントと呼ばれる．Qと適当なクレプシュ・ゴルダン係数を用いて

$$e\langle\alpha,\ j,\ m'|(x^2-y^2)|\alpha,\ j,\ m=j\rangle$$

 (ここで $m'=j,\ j-1,\ j-2,\ \cdots\cdots$) を計算せよ．

29. 原点に置かれたスピン $\frac{3}{2}$ の原子核が，外部から不均一な電場を受けている．題意の電気4重極相互作用は

$$H_{\text{int}} = \frac{eQ}{2S(S-1)\hbar^2}\left[\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_0 S_x^2 + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)_0 S_y^2 + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right)_0 S_z^2\right]$$

のようにとることができる．ここで ϕ はラプラス方程式を満たす静電ポテンシャルであり，座標軸は

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}\right)_0 = \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y\partial z}\right)_0 = \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z\partial x}\right)_0 = 0$$

となるように選ばれている．このとき相互作用エネルギーは

$$A(3S_z^2 - \boldsymbol{S}^2) + B(S_+^2 + S_-^2)$$

のように書くことができることを示し，A と B を $(\partial^2\phi/\partial x^2)_0$ などで表わせ．エネルギー固有ケットを（$|m>$，$m=\pm\frac{3}{2}$，$\pm\frac{1}{2}$ を用いて）定め，対応するエネルギー固有値を求めよ．縮退はあるか．

付　録　A

シュレーディンガーの波動方程式
——基本的解の要約

ここで解答が可能ないろいろなポテンシャル問題に対して，シュレーディンガーの波動方程式の簡単な解をまとめておく．

A.1.　自由粒子（$V=0$）

平面波，すなわち運動量の固有関数は

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x},\ t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-i\omega t} \tag{A.1.1}$$

である．ここで

$$\boldsymbol{k}=\frac{\boldsymbol{p}}{\hbar},\quad \omega=\frac{E}{\hbar}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m\hbar}=\frac{\hbar\boldsymbol{k}^2}{2m} \tag{A.1.2}$$

であり，規格化条件は

$$\int\psi_{\boldsymbol{k}'}^{*}\psi_{\boldsymbol{k}}d^3x=\delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \tag{A.1.3}$$

である．平面波を重ね合せると，波束による記述ができる．1次元の場合には

$$\psi(x,\ t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dkA(k)e^{i(kx-\omega t)},\qquad \left(\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}\right) \tag{A.1.4}$$

となる．$|A(k)|$が $k \simeq k_0$ の近傍で鋭く山を作っている場合，波束は群速度

$$v_g \simeq \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} \tag{A.1.5}$$

で移動する．最小波束の時間的発展は

$$\psi(x,\ t) = \left[\frac{(\Delta x)_0^2}{2\pi^3}\right]^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\Delta x)_0^2(k-k_0)^2 + ikx - i\omega(k)t} dk,$$

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{A.1.6}$$

のように記述することができる．このとき

$$|\psi(x,\ t)|^2 = \left\{\frac{1}{2\pi(\Delta x)_0^2[1+(\hbar^2 t^2/4m^2)(\Delta x)_0^{-4}]}\right\}^{1/2}$$

$$\times \exp\left\{-\frac{(x-\hbar k_0 t/m)^2}{2(\Delta x)_0^2[1+(\hbar^2 t^2/4m^2)(\Delta x)_0^{-4}]}\right\} \tag{A.1.7}$$

であるから，波束の幅は

$$(\Delta x)_0,\ \ t=0 \longrightarrow (\Delta x)_0\left[1+\frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}(\Delta x)_0^{-4}\right]^{1/2}, \qquad t>0 \tag{A.1.8}$$

のように拡がっていく．

A.2.　区分区分で一定な1次元ポテンシャル

基本解は次の通りである：

$E > V_0 = V_0$：　$\psi_E(x) = c_+ e^{ikx} + c_- e^{-ikx}$,

$$k = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \tag{A.2.1}$$

$E < V = V_0$（古典的に許されない領域）：

$$\psi_E(x) = c_+ e^{\varkappa x} + c_- e^{-\varkappa x},\quad \varkappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \tag{A.2.2}$$

(考える領域中に $x = \pm\infty$ が含まれるときは，$c_\pm$ をゼロとしなければならない．複合同順)

堅い壁のポテンシャル(1次元の箱)

このとき

$$V = \begin{cases} 0\ , & 0 < x < L \\ \infty\ , & \text{それ以外} \end{cases} \tag{A.2.3}$$

である．波動関数とエネルギー固有値は

$$\begin{aligned} \psi_E(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi\, x}{L}\right), \qquad n = 1, 2, 3 \cdots \\ E &= \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \end{aligned} \tag{A.2.4}$$

である．

井戸型ポテンシャル

ポテンシャル V は

$$V = \begin{cases} 0\ , & |x| > a \\ -V_0\ , & |x| < a \qquad (V_0 > 0) \end{cases} \tag{A.2.5}$$

である．束縛状態（$E < 0$）の解は

$$\psi_E \sim \begin{cases} e^{-\varkappa|x|}, & |x| > a \\ \cos kx,\ (\text{偶パリティー}) & |x| < a \\ \sin kx,\ (\text{奇パリティー}) & |x| < a \end{cases} \tag{A.2.6}$$

である．ここで

$$k = \sqrt{\frac{2m(-|E| + V_0)}{\hbar^2}}\ ,\quad \varkappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \tag{A.2.7}$$

である．エネルギー $E=-\hbar^2\varkappa^2/2m$ の取り得る不連続値は

$$\begin{aligned} ka\tan ka &= \varkappa a \quad (\text{偶パリティー}) \\ ka\cot ka &= -\varkappa a \quad (\text{奇パリティー}) \end{aligned} \tag{A.2.8}$$

を解いて決められる．$\varkappa$ と k が

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}=(k^2+\varkappa^2)a^2 \tag{A.2.9}$$

によって関連していることにも注意しよう．

A. 3.　透過-反射の問題

ここで透過率 T は，入射波の流束に対する透過波の流束の比と定義する．以下，簡単な例を考察する．

井戸($V=0,\ |x|>a\,;\ V=-V_0,\ |x|<a$)

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{\{1+[(k'^2-k^2)^2/4k^2k'^2]\sin^2 2k'a\}} \\ &= \frac{1}{\{1+[V_0^2/4E(E+V_0)]\sin^2(2a\sqrt{2m(E+V_0)/\hbar^2})\}} \end{aligned} \tag{A.3.1}$$

ここで

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\quad k'=\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \tag{A.3.2}$$

である．共鳴現象が

$$2a\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}=n\pi,\qquad n=1,2,3\cdots \tag{A.3.3}$$

のとき起こることに注意しよう.

ポテンシャル障壁（$V=0$, $|x|>a$; $V=V_0>0$, $|x|<a$）

第1の場合：$E<V_0$

$$T=\frac{1}{\{1+[(k^2+\kappa^2)^2/4k^2\kappa^2]\sinh^2 2\kappa a\}}$$
$$=\frac{1}{\{1+[V_0^2/4E(V_0-E)]\sinh^2(2a\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2})\}} \tag{A.3.4}$$

第2の場合：$E>V_0$. この場合は井戸の場合と同じ式で V_0 を $-V_0$ で置き換えたものになる.

ポテンシャルの段（$V=0, x<0$; $V=V_0, x>0$ および $E>V_0$）

$$T=\frac{4kk'}{(k+k')^2}=\frac{4\sqrt{(E-V_0)E}}{(\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0})^2} \tag{A.3.5}$$

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\quad k'=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \tag{A.3.6}$$

一般的なポテンシャル障壁（$V(x)>E$, $a<x<b$; $V(x)<E$, $[a,b]$ 以外の領域）

T に対する JWKB 近似解は

$$T\simeq\exp\left\{-2\int_a^b dx\sqrt{\frac{2m[V(x)-E]}{\hbar^2}}\right\} \tag{A.3.7}$$

であり，a, b は古典的転回点である．*

A.4. 調和振動子

ポテンシャルは

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \tag{A.4.1}$$

である．ここで無次元の変数

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x \tag{A.4.2}$$

を導入すると，エネルギー固有関数は

$$\psi_E = (2^n n!)^{-1/2}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \tag{A.4.3}$$

と書ける．エネルギー準位は

$$E = \hbar\,\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2\cdots \tag{A.4.4}$$

である．エルミート多項式 $H_n(\xi)$ は次のような性質を持つ：

$$\begin{aligned}
&H_n(\xi) = (-1)^n\, e^{\xi^2}\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}e^{-\xi^2},\\
&\int_{-\infty}^{\infty} H_{n'}(\xi)H_n(\xi)e^{-\xi^2}d\xi = \pi^{1/2}\,2^n n!\,\delta_{nn'},\\
&\frac{d^2}{d\xi^2}H_n - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0,\\
&H_0(\xi) = 1, \qquad H_1(\xi) = 2\xi,\\
&H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi,
\end{aligned} \tag{A.4.5}$$

---

* JWKB は Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin を表わす．

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12.$$

A.5.　中心力の問題［球対称ポテンシャル $V=V(r)$］

ここで基本になる微分方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi_E}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi_E}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi_E}{\partial\phi^2}\right] + V(r)\psi_E = E\psi_E \tag{A.5.1}$$

である．この式の球対称ポテンシャル $V(r)$ は

$$\lim_{r\to 0} r^2 V(r) \to 0 \tag{A.5.2}$$

を満たすとする．変数分離法を用い

$$\psi_E(\boldsymbol{x}) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi) \tag{A.5.3}$$

とすると，角度部分の方程式として

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y_l^m = l(l+1)Y_l^m \tag{A.5.4}$$

が導かれる．ここで球面調和関数

$$Y_l^m(\theta, \phi), \qquad l = 0, 1, 2, \cdots \qquad m = -l, -l+1, \cdots, +l \tag{A.5.5}$$

は

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m = mY_l^m \tag{A.5.6}$$

を満たす．$Y_l^m(\theta, \phi)$ には次のような性質がある：

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi} \qquad (m \geq 0),$$

$$Y_l^m(\theta,\ \phi) = (-1)^{|m|} Y_l^{|m|*}(\theta,\ \phi), \qquad (m < 0),$$

$$P_l^m(\cos\theta) = (1 - \cos^2\theta)^{m/2} \frac{d^m}{d(\cos\theta)^m} P_l(\cos\theta), \qquad (m \geq 0),$$

$$P_l(\cos\theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l (1-\cos^2\theta)^l}{d(\cos\theta)^l},$$

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \qquad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, \tag{A.5.7}$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (\sin\theta) e^{\pm i\phi},$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1),$$

$$Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} (\sin\theta\cos\theta) e^{\pm i\phi},$$

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (\sin^2\theta) e^{\pm 2i\phi},$$

$$\int Y_{l'}^{m'*}(\theta,\ \phi)\, Y_l^m(\theta,\ \phi) d\Omega = \delta_{ll'}\delta_{mm'}, \quad \left[\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta)\right].$$

(A.5.3)の動径部分を求めるために

$$u_E(r) = rR(r) \tag{A.5.8}$$

を定義しよう．すると動径部分の方程式は，同等な 1 次元問題の方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_E}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u_E = E u_E \tag{A.5.9}$$

に書きかえられる．これを境界条件

$$u_E(r)|_{r=0} = 0$$

の下で解く．自由粒子 [$V(r) = 0$] の場合，球座標で

$$R(r) = c_1 j_l(\rho) + c_2 n_l(\rho) \tag{A.5.10}$$

（原点が含まれるときは $c_2=0$）

が得られる．ここで ρ は無次元の変数

$$\rho \equiv kr, \qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{A.5.11}$$

である．

ここでベッセル関数および球ベッセル，球ハンケル関数の，よく使われている性質を列記しておく必要がある．球ベッセル関数は

$$\begin{aligned}
j_l(\rho) &= \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(\rho), \\
n_l(\rho) &= (-1)^{l+1}\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{-l-1/2}(\rho), \\
j_0(\rho) &= \frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad n_0(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho} \\
j_1(\rho) &= \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho}, \quad n_1(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\sin\rho}{\rho}, \\
j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\sin\rho - \frac{3}{\rho^2}\cos\rho, \\
n_2(\rho) &= -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\cos\rho - \frac{3}{\rho^2}\sin\rho
\end{aligned} \tag{A.5.12}$$

である．極限 $\rho \to 0$ で主な寄与を与える項は

$$j_l(\rho) \underset{\rho\to 0}{\longrightarrow} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}, \qquad n_l(\rho) \underset{\rho\to 0}{\longrightarrow} -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}} \tag{A.5.13}$$

となり，ここで

$$(2l+1)!! \equiv (2l+1)(2l-1)\cdots\cdots 5\cdot 3\cdot 1 \tag{A.5.14}$$

である．大きな ρ に対する漸近形は

$$j_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho}\cos\left[\rho - \frac{(l+1)\pi}{2}\right],$$

$$n_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho}\sin\left[\rho - \frac{(l+1)\pi}{2}\right] \tag{A.5.15}$$

である．

制約 (A.5.8) および (A.5.9) により，$R(r)$は $r=0$ で有限でなければならないので，(A.5.10)と(A.5.13)から分かるように，$\rho\to 0$ のとき特異性を持つ $n_l(\rho)$ の項は除かれなければならない．したがって $R(r)=c_1 j_l(\rho)$ [または第 7 章7.6 節の記号で，$A_l(r) = R(r) = c_1 j_l(\rho)$] が得られる．3 次元の井戸型ポテンシャルに対しては，$r < R$ で $V = -V_0$（$V_0 > 0$）だから，求める解は

$$R(r) = A_l(r) = (\text{定数})\cdot j_l(\alpha r) \tag{A.5.16}$$

ただし

$$\alpha = \left[\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \quad r < R \tag{A.5.17}$$

である．式(7.6.30)で議論されるように，$V = 0$ である外部 ($r > R$) での解は，球ハンケル関数の 1 次結合で書くことができる．この関数は次のように定義される：

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\rho) &= j_l(\rho) + i n_l(\rho), \\ h_l^{(1)*}(\rho) &= h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - i n_l(\rho) \end{aligned} \tag{A.5.18}$$

これらは(A.5.15)により $\rho\to\infty$ で次のような漸近形を持つ：

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\rho) &\underset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho} e^{i[\rho-(l+1)\pi/2]}, \\ h_l^{(1)*}(\rho) = h_l^{(2)}(\rho) &\underset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho} e^{-i[\rho-(l+1)\pi/2]}. \end{aligned} \tag{A.5.19}$$

3 次元井戸型ポテンシャルの束縛状態のエネルギー準位に興味がある

ならば，$V(r)=0$，$r>R$ であるから

$$u_l(r)=rA_l(r)=(\text{定数})\cdot e^{-\varkappa r}f\left(\frac{1}{\varkappa r}\right)$$

$$\varkappa=\left(\frac{2m|E|}{\hbar^2}\right)^{1/2} \tag{A.5.20}$$

を考える．(A.5.19)で主要項が与えられている漸近展開に，逆符号の指数の項が含まれていない限り，$r>R$ に対して求める解として(A.5.20)から

$$\begin{aligned}A_l(r)&=(\text{定数})\cdot h_l^{(1)}(i\varkappa r)\\&=(\text{定数})\cdot\Big[j_l(i\varkappa r)+in_l(i\varkappa r)\Big]\end{aligned} \tag{A.5.21}$$

が得られる．この関数のはじめの三つは

$$\begin{aligned}h_0^{(1)}(i\varkappa r)&=-\frac{1}{\varkappa r}e^{-\varkappa r}\\h_1^{(1)}(i\varkappa r)&=i\left(\frac{1}{\varkappa r}+\frac{1}{\varkappa^2r^2}\right)e^{-\varkappa r}\\h_2^{(1)}(i\varkappa r)&=\left(\frac{1}{\varkappa r}+\frac{3}{\varkappa^2r^2}+\frac{3}{\varkappa^3r^3}\right)e^{-\varkappa r}\end{aligned} \tag{A.5.22}$$

である．

最後に，自由粒子［$V(r)=0$］でなく一定値のポテンシャル $V(r)=V_0$ の場合を考えるときは，自由粒子の解［(A.5.10)と(A.5.11)］で単に E を $E-V_0$ に置きかえればよい．$E<V_0$ の場合も，$\varkappa=\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$ として $h_l^{(1,2)}(i\varkappa r)$ が使えることに注意しよう．

A.6. 水素原子

この問題でポテンシャルは

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r} \tag{A.6.1}$$

である．無次元の変数

$$\rho=\left(\frac{8m_e|E|}{\hbar^2}\right)^{1/2}r \tag{A.6.2}$$

を導入すると，エネルギー固有関数と固有値(エネルギー準位)は

$$\psi_{nlm}=R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\ \phi),$$

$$R_{nl}(r)=-\left\{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{1/2}e^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho),$$

$$E_n=\frac{-Z^2e^2}{2n^2a_0}\quad (l\ と\ m\ に依らない),$$

$$a_0=ボーア半径=\frac{\hbar^2}{m_ee^2},$$

$$n\geq l+1,\qquad \rho=\frac{2Zr}{na_0} \tag{A.6.3}$$

で表わされる．上式の中のラゲールの陪多項式は

$$L_p^q(\rho)=\frac{d^q}{d\rho^q}L_p(\rho), \tag{A.6.4}$$

$$L_p(\rho)=e^\rho\frac{d^p}{d\rho^p}(\rho^pe^{-\rho}) \tag{A.6.5}$$

で定義されており，その規格化積分(normalization integral)は

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{2l+2}[L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2d\rho=\frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \tag{A.6.6}$$

である．動径関数は n が小さい場合

$$R_{10}(r)=\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}2e^{-Zr/a_0},$$

$$R_{20}(r)=\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}, \tag{A.6.7}$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{\sqrt{3}\,a_0} e^{-Zr/2a_0}$$

で与えられる．動径 r を含む積分として次の式をあげておく．

$$< r^k > \equiv \int_0^\infty dr r^{2+k} [R_{nl}(r)]^2$$

とおくとき

$$< r > = \left(\frac{a_0}{2Z}\right)[3n^2 - l(l+1)],$$

$$< r^2 > = \left(\frac{{a_0}^2 n^2}{2Z^2}\right)[5n^2 + 1 - 3l(l+1)] \qquad \text{(A.6.8)}$$

$$< \frac{1}{r} > = \frac{Z}{n^2 a_0}$$

$$< \frac{1}{r^2} > = \frac{Z^2}{\left[n^3 {a_0}^2 (l+\frac{1}{2})\right]}$$

などである．

付　録 B

角運動量の合成則
—不等式(3.7.38)—の証明

角運動量の合成則を量子力学の観点から議論するのは，有益であろう．さしあたり，二つの角運動量の大きさを $j_1 \geqq j_2$ としておく．いつでもこのように置くことができる．等式(3.7.35)より，m の最大値 $m^{\max}$ は

$$m^{\max} = m_1^{\max} + m_2^{\max} = j_1 + j_2 \tag{B.1.1}$$

である．固有値 $m^{\max}$ に対応して，ただ一つのケットが存在する．これは状態を $|j_1j_2;m_1m_2>$ を用いて記述しようと $|j_1j_2;jm>$ を用いて記述しようと同じである．すなわち位相因子を 1 に選ぶと

$$|j_1j_2;j_1j_2> = |j_1j_2;j_1+j_2,\ j_1+j_2> \tag{B.1.2}$$

が成り立つ．次に m の固有値が $m^{\max}-1$ のとき基底として $|j_1j_2;m_1m_2>$ を用いると，対応して二つのケットが存在する．一つは $m_1 = m_1^{\max}-1$ かつ $m_2 = m_2^{\max}$ のケットであり，他の一つは $m_1 = m_1^{\max}$ かつ $m_2 = m_2^{\max}-1$ のケットである．このようにこの基底では二重縮退がある．したがって $|j_1j_2;jm>$ の基底でも同じように二重縮退がなければならない．この縮退はどこからくるのであろうか．明らかに $m^{\max}-1$ は $j = j_1 + j_2$ として取ることのできる m の値である．これはまた $j = j_1 + j_2 - 1$ としても取ることのできる m の値である．つまり j_1 と j_2 を合成した j として，j_1+j_2 と j_1+j_2-1 を作るこ

とができる.

このようなことを次々と続けられるのであるが，もちろん縮退が無限に増大することはない．実際 $m^{\min} = -j_1 - j_2$ に対しては，再び一重項のみがある．最大の縮退が($2j_2+1$)重であることは，表B.1から明らかである．この表は $j_1=2$，$j_2=1$ および $j_1=2$，$j_2=\frac{1}{2}$ の二つの特別な例に対して作ってある．$|j_1 j_2; m_1 m_2>$ 基底でのこの$(2j_2+1)$重の縮退は，$(2j_2+1)$個の j の状態と関連していなければならない：

$$j_1+j_2,\quad j_1+j_2-1,\quad \cdots,\quad j_1-j_2. \tag{B.1.3}$$

はじめの制限 $j_1 \geq j_2$ をはずすと(3.7.38)が得られる.

表 B.1　例として二つの特別な場合，$j_1=2$，$j_2=1$ および $j_1=2$，$j_2=\frac{1}{2}$ に対して m，m_1 および m_2 の値を示す。

$j_1=2$, $j_2=1$							
m	3	2	1	0	−1	−2	−3
(m_1, m_2)	(2, 1)	(1, 1)	(0, 1)	(−1, 1)	(−2, 1)		
		(2, 0)	(1, 0)	(0, 0)	(−1, 0)	(−2, 0)	
			(2, −1)	(1, −1)	(0, −1)	(−1, −1)	(−2, −1)
状態数	1	2	3	3	3	2	1

$j_1=2$, $j_2=\frac{1}{2}$						
m	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{5}{2}$
(m_1, m_2)	$(2, \frac{1}{2})$	$(1, \frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{2})$	$(-1, \frac{1}{2})$	$(-2, \frac{1}{2})$	
		$(2, -\frac{1}{2})$	$(1, -\frac{1}{2})$	$(0, -\frac{1}{2})$	$(-1, -\frac{1}{2})$	$(-2, -\frac{1}{2})$
状態数	1	2	2	2	2	1

文献リスト[†]

量子力学に関する文献は数多く多種多様である．ここでは，特にこの教科書で引用した本のリストのほか，この教科書（主として大学院1年生向きである）への予備知識を与えるやや初等的な量子力学の教科書（一般に学部学生のレベルである）を参考書としてあげた．多くの本が初等量子力学に関して書かれているから，この参考書のリストはもちろん完全を期したものではない．編者はここに推薦した本の何冊かを学び，他の何冊かを読み，またいくらかには目を通したが，見落した本もおそらくあるだろう．きっとひどい脱落があるに違いないことを，あらかじめおわびしておく．また，この本の全体を通じて，あまり原論文を引用しようとはしていない．引用されたものも少しあるが，脚註あるいは本文中に記した．本書の主な目的が大学院の基礎入門課程の教科書として役立つことにあるのだから，この扱いは適切であると信じる．

引　用　書

Baym, G. *Lectures on Quantum Mechanics*, New York: W. A. Benjamin, 1969.

Bethe, H. A., and R. W. Jackiw. *Intermediate Quantum Mechanics*, 2nd ed., New York: W. A. Benjamin, 1968.

Bjorken, J. D., and S. D. Drell, *Relativistic Quantum Fields*, New York; McGraw-Hill, 1965.

Biedenharn, L. C., and H. Van Dam. (eds) *Quantum Theory of Angular Momentum*, New York: Academic Press, 1965.

Dirac, P. A. M. *Quantum Mechanics*, 4th ed., London: Oxford Univ. Press, 1958.

P. A. M. ディラック：「量子力学（第4版）リプリント」みすず書房．

† 訳注：和訳されている文献については付記し，現在入手が困難なものに☆印を記した．

「ディラック：量子力学（原書第4版）」朝永振一郎，玉木英彦，木庭二郎，大塚益比古，伊藤大介訳，岩波書店．

Edmonds, A. R. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton, NJ: Princeton University Press, 1960.

Fermi, E. *Nuclear Physics*, Chicago: University of Chicago Press, 1950.

フェルミ：「原子核物理学」小林稔他訳，吉岡書店．☆

Feynman, R. P., and A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*, New York: McGraw-Hill, 1964.†

Finkelstein, R. J. *Nonrelativistic Mechanics*, Reading, MA: W. A. Benjamin, 1973.

Frauenfelder, H., and E. M. Henley. *Subatomic Physics*, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1974.

H. フラウエンフェルダー，E. M. ヘンレイ：「サブアトミック・フィジックス（上，下）」藤井忠男訳，産業図書．

French, A. P., and E. F. Taylor. *An Introduction to Quantum Physics*, New York: W. W. Norton, 1978.

Goldberger, M. L., and K. M. Watson. *Collision Theory*, New York: Wiley, 1964.

Goldstein, H. *Classical Mechanics*, 2nd. ed., Reading, MA: Addison-Wesley, 1980.

ゴールドスタイン：「新版古典力学（上，下）」瀬川富士，矢野忠，江沢康生訳，吉岡書店．

Gottfried, K. *Quantum Mechanics*, vol. I, New York: W. A. Benjamin, 1966.

Jackson, J. D. *Classical Electrodynamics*, 3rd. ed., New York: Wiley, 1998

ジャクソン：「電磁気学（上，下）」西田稔訳，吉岡書店．

Merzbacher, E. *Quantum Mechanics*, 2nd ed., New York: Wiley, 1970.

メルツベッヘル：「量子力学(上，下)」高橋安太郎訳，講談社．☆

Morse, P. M., and H. Feshbach. *Methods of Theoretical Physics*, (2 vols.), New York: McGraw-Hill, 1953.

Newton, R. G. *Scattering Theory of Waves and Particles*, 2nd. ed., New York: McGraw-Hill, 1982.

Preston, M. *Physics of the Nucleus*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1962.

Sakurai, J. J. *Advanced Quantum Mechanics*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1967.

Sargent III, M., M. O. Scully, and W. E. Lamb, Jr. *Laser Physics*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1974.

サージェントⅢ，スカリー，ラム：「レーザー物理」霜田光一他訳，丸善．

† ファインマン「経路積分と量子力学」北原和夫訳，マグロウヒル．

Saxon, D. S. *Elementary Quantum Mechanics*. San Francisco: Holden-Day, 1968.
Schiff, L. *Quantum Mechanics*, 3rd. ed., New York: McGraw-Hill, 1968.

シッフ:「新版量子力学(上，下)」井上健訳，吉岡書店.

Whittaker, E. T., and G. N. Watson. *A Course of Modern Analysis*, New York: Cambridge University Press, 1965.

参 考 書

Dicke, R. H., and J. P. Wittke, *Introduction to Quantum Mechanics*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1960.

初級・中級レベルの非常に読み易く簡明な教科書．このレベルの教科書ではふつう扱われない二，三の課題，とりわけ量子統計力学を議論している．

Feynman, R. P., R. B. Leighton, and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, vol. 3, *Quantum Mechanics*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1965.

R. P. ファインマン，R. B. レイトン，M. L. サンズ共著:「ファイマン物理学，V量子力学」砂川重信訳，岩波書店.

この本は，状態ベクトルの観点から主題に接近する量子力学の手引書である．この接近は――ディラックの一流の方法と共に――本書のはじめの章に大いに活気を吹きこみ内容を豊かにした．多くの魅力的な例（例えばシュテルン・ゲルラッハの実験）が，できるだけ数式を使わずに議論してあり注目に値する．

Gasiorowicz, S. *Quantum Physics*, New York: Wiley 1974.

この教科書のレベルは Dicke and Wittke 1960 とだいたい同じである．Gasiorowicz はとても有能な教育者としても著名であり，素粒子論の一線の研究領域でもむずかしい概念を簡明に説明している．彼の量子力学の教科書がこの明晰さを反映しているのは当然であり，そのためこの本はとても読みやすい．

Mandl, F. *Quantum Mechanics*, London: Butterworths Scientific Publications, 1957.

この本は Gasiorowicz と同程度のレベルで，波動力学の基礎と数学的原理をはっきりとまた簡潔に提示している．

Matthews, P. T. *Introduction to Quantum Mechanics*, 3rd ed., London: McGraw-Hill, 1974.

マシューズ:「初等量子力学」藤井昭彦訳，培風館.

この第3版は学部学生向きの明快で簡潔な本で，参考書なしで読める. 波動力学と行列力学を展開するための数学的に整った手引きが，明確に定義された要請に基づいて書かれている.

Mott, N. F. *Elements of Wave Mechanics*, London: Cambridge University Press, 1952.

開拓者の一人による波動力学の短いが楽しく読める本. 理論のレベルは初等的である.

Park, D. *Introduction to the Quantum Theory*, 2nd. ed., New York: McGraw-Hill, 1974.

すぐれた教育者によって書かれた上級学部学生向きのこの魅力的な教科書は，量子力学の一般的入門を講じたのち物理の様々な分野への重要な応用を述べ，理論の異なった側面を説明している. 応用に関しては自習できるように書かれているので，学生はこの本を参考書として使えるであろう.

Pauling, L., and E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics*, New York: McGraw-Hill, 1935.

ポーリング，ウィルソン:「量子力学序論(改訳)」坂井富之助，坂田民雄，玉木英彦，徳光直訳，白水社. ☆

いささか古い教科書の一つだが，いまでも勉強する価値が十分にある本. 水素原子と調和振動子についての驚くほど完全な扱いが波動力学の観点から述べてある.

Rojansky, V. *Introductory Quantum Mechanics*, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1938.

古い著作であるが波動力学と行列力学の基本的原理の詳述はとくに貴重であり，古典的教科書の地位を保っている.

[訳者追補]

マーチン：「量子力学」水野幸夫訳，丸善.

今日的視点にたった初等的入門書.

メシア：「量子力学（全3巻）」小出昭一郎，田村二郎訳，東京図書.

本書のよい参考書になる本格的な教科書.

ランダウ，リフシッツ：「量子力学改訂新版（原書第3版）（全2巻）」好村滋洋，井上健男，佐々木健共訳，東京図書.

やや程度の高い名著.

索　引

（上　巻）

ア　行

カ　行

タ　行

マ 行

ヤ 行

ラ 行

訳者紹介

桜井明夫（さくらい あきお）

1967年東京大学理学系大学
院博士課程修了
1967~1978年東京大学物性
研究所，ベルリン自由大学
理論物理学研究所勤務
現在：京都産業大学名誉教
授　理学博士

J. J. Sakurai：現代の量子力学（上）　1989 ©

1989年2月25日　第1刷発行
2009年7月25日　第15刷発行

訳　者　桜　井　明　夫

発行者　吉　岡　　誠

〒606-8225 京都市左京区田中門前町87
株式会社　吉　岡　書　店

（物理学叢書 56）

電話(075)781-4747/振替 01030-8-4624

藤原製本株式会社印刷事業部

ISBN978-4-8427-0222-3